

06 AOUT 2004

REC'D 05 NOV 2004

WIPO PCT



# BREVET D'INVENTION

**CERTIFICAT D'UTILITÉ - CERTIFICAT D'ADDITION**

## COPIE OFFICIELLE

Le Directeur général de l'Institut national de la propriété industrielle certifie que le document ci-annexé est la copie certifiée conforme d'une demande de titre de propriété industrielle déposée à l'Institut.

Fait à Paris, le 30 JUL. 2004

Pour le Directeur général de l'Institut  
national de la propriété industrielle  
Le Chef du Département des brevets

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'M. Planche', enclosed within a large, stylized oval loop.

Martine PLANCHE

**DOCUMENT DE  
PRIORITÉ**

**PRÉSENTÉ OU TRANSMIS  
CONFORMÉMENT À LA RÈGLE  
17.1. a) OU b)**

**INSTITUT  
NATIONAL DE  
LA PROPRIÉTÉ  
INDUSTRIELLE**

**SIEGE**  
26 bis, rue de Saint-Petersbourg  
75800 PARIS cedex 08  
Téléphone : 33 (0)1 53 04 53 04  
Télécopie : 33 (0)1 53 04 45 23  
[www.inpi.fr](http://www.inpi.fr)

Post Available Copy



26 bis, rue de Saint Pétersbourg - 75800 Paris Cedex 08

Pour vous Informer : INPI DIRECT

INPI DIRECT 0 825 83 85 87  
0,15 € TTC/mn

Télécopie : 33 (0)1 53 04 52 65

Réservé à l'INPI

1er dépôt

# BREVET D'INVENTION CERTIFICAT D'UTILITÉ

Code de la propriété intellectuelle - Livre VI



N° 11354\*03

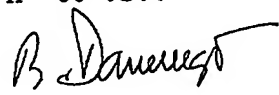
## REQUÊTE EN DÉLIVRANCE page 1/2

BR1

Cet imprimé est à remplir lisiblement à l'encre noire

DB 540 @ W / 030103

<b>REMISE DES PIÈCES</b> DATE <b>28 JUIL 2003</b> LIEU <b>75 INPI PARIS</b> N° D'ENREGISTREMENT <b>0309252</b> NATIONAL ATTRIBUÉ PAR L'INPI DATE DE DÉPÔT ATTRIBUÉE PAR L'INPI <b>28 Jan 16 03</b>		<input checked="" type="checkbox"/> <b>NOM ET ADRESSE DU DEMANDEUR OU DU MANDATAIRE À QUI LA CORRESPONDANCE DOIT ÊTRE ADRESSÉE</b>  <b>CABINET LAVOIX</b> <b>2, Place d'Estienne d'Orves</b> <b>75441 PARIS CEDEX 09</b>	
<b>Vos références pour ce dossier (facultatif)</b> <b>BFF 03P0076</b>			
<b>Confirmation d'un dépôt par télécopie</b>		<input type="checkbox"/> N° attribué par l'INPI à la télécopie	
<b>2 NATURE DE LA DEMANDE</b>		<b>Cochez l'une des 4 cases suivantes</b>	
Demande de brevet		<input checked="" type="checkbox"/>	
Demande de certificat d'utilité		<input type="checkbox"/>	
Demande divisionnaire		<input type="checkbox"/>	
Demande de brevet initiale		N° _____ Date _____	
ou demande de certificat d'utilité initiale		N° _____ Date _____	
Transformation d'une demande de brevet européen <i>Demande de brevet initiale</i>		<input type="checkbox"/>	
		N° _____ Date _____	
<b>3 TITRE DE L'INVENTION (200 caractères ou espaces maximum)</b> <b>Procédé de détermination des contraintes, déformations, endommagement de pièces constituées d'un matériau solide.</b>			
<b>4 DÉCLARATION DE PRIORITÉ OU REQUÊTE DU BÉNÉFICE DE LA DATE DE DÉPÔT D'UNE DEMANDE ANTÉRIEURE FRANÇAISE</b>		Pays ou organisation _____ N° _____ Date _____ Pays ou organisation _____ N° _____ Date _____ Pays ou organisation _____ N° _____ <input type="checkbox"/> S'il y a d'autres priorités, cochez la case et utilisez l'imprimé «Suite»	
<b>5 DEMANDEUR (Cochez l'une des 2 cases)</b>		<input checked="" type="checkbox"/> <b>Personne morale</b> <input type="checkbox"/> <b>Personne physique</b>	
Nom ou dénomination sociale		ELECTRICITE DE FRANCE - SERVICE NATIONAL	
Prénoms			
Forme juridique			
N° SIREN		552081317	
Code APE-NAF			
Domicile ou siège		22-30 Avenue de Wagram	
Rue			
Code postal et ville		75008 PARIS	
Pays		FRANCE	
Nationalité		Française	
N° de téléphone (facultatif)		N° de télécopie (facultatif)	
Adresse électronique (facultatif)			
<input type="checkbox"/> S'il y a plus d'un demandeur, cochez la case et utilisez l'imprimé «Suite»			

REMISE DES PIÈCES DATE <b>28 JUIL 2003</b> LIEU <b>75 INPI PARIS</b> N° D'ENREGISTREMENT <b>0309252</b> NATIONAL ATTRIBUÉ PAR L'INPI		Réservé à l'INPI DB 540 W / 030103
<b>6 MANDATAIRE (s'il y a lieu)</b> Nom _____ Prénom _____ Cabinet ou Société <b>CABINET LAVOIX</b> N° de pouvoir permanent et/ou de lien contractuel _____ Adresse Rue <b>2 Place d'Estienne d'Orves</b> Code postal et ville <b>75441 PARIS CEDEX 09</b> Pays <b>FRANCE</b> N° de téléphone (facultatif) <b>01 53 20 14 20</b> N° de télécopie (facultatif) <b>01 48 74 54 56</b> Adresse électronique (facultatif) <b>brevets@cabinet-lavoix.com</b>		
<b>7 INVENTEUR (S)</b> Les inventeurs sont nécessairement des personnes physiques <input type="checkbox"/> Oui <input checked="" type="checkbox"/> Non : Dans ce cas remplir le formulaire de Désignation d'inventeur(s)		
<b>8 RAPPORT DE RECHERCHE</b> Établissement immédiat ou établissement différé <input checked="" type="checkbox"/> Paiement échelonné de la redevance (en deux versements) <input type="checkbox"/> Oui <input type="checkbox"/> Non Uniquement pour les personnes physiques effectuant elles-mêmes leur propre dépôt		
<b>9 RÉDUCTION DU TAUX DES REDEVANCES</b> Uniquement pour les personnes physiques <input type="checkbox"/> Requête pour la première fois pour cette invention (joindre un avis de non-imposition) <input type="checkbox"/> Obtenue antérieurement à ce dépôt pour cette invention (joindre une copie de la décision d'admission à l'assistance gratuite ou indiquer sa référence) : AG _____		
<b>10 SÉQUENCES DE NUCLEOTIDES ET/OU D'ACIDES AMINÉS</b> <input type="checkbox"/> Cochez la case si la description contient une liste de séquences		
Le support électronique de données est joint <input type="checkbox"/> La déclaration de conformité de la liste de séquences sur support papier avec le support électronique de données est jointe <input type="checkbox"/> Si vous avez utilisé l'imprimé «Suite», indiquez le nombre de pages jointes _____		
<b>11 SIGNATURE DU DEMANDEUR OU DU MANDATAIRE</b> (Nom et qualité du signataire) B. DOMENEGO n° 00-0500 		<b>VISA DE LA PRÉFECTURE OU DE L'INPI</b> <b>L. MARIELLO</b>

La présente invention concerne un procédé pour déterminer les effets d'une sollicitation mécanique sur un objet constitué d'un matériau solide.

Dans de nombreux domaines techniques, on a besoin de  
5 déterminer l'incidence de sollicitations mécaniques sur des pièces, notamment des pièces métalliques, soit afin d'optimiser des procédés de fabrication comportant des opérations de mise en forme, soit afin de prévoir le comportement en service de pièces dans des conditions  
10 complexes.

Les procédés de mise en forme concernés sont les procédés de mise en forme par déformation plastique tels que l'emboutissage de tôles, l'étirage de tubes, le forgeage de pièces de mécanique. Ces procédés peuvent  
15 avoir une incidence importante sur les propriétés du matériau constitutif des pièces concernées, et il est important de pouvoir prévoir cette incidence de façon à permettre d'évaluer à priori le comportement en service des pièces obtenues.

20 Les sollicitations en service des pièces sont diverses et correspondent à toutes les sollicitations que l'on peut rencontrer, par exemple à l'effet d'efforts permanents, l'effet d'efforts appliqués progressivement à des vitesses plus ou moins élevées, d'efforts appliqués  
25 de façon périodique, d'efforts appliqués dans des conditions de température ambiante ou bien d'efforts appliqués dans des conditions de température soit élevée soit très basse.

Afin d'évaluer les effets de ces sollicitations  
30 mécaniques sur des pièces, on utilise de façon connue des méthodes de calcul numérique, en mode élastique ou anélastique. Ces méthodes de calcul sont, notamment, les

méthodes par différences finies et les méthodes de type Galerkin reposant sur une décomposition sur des fonctions de base dont un type particulier est la méthode par éléments finis. Par "mode anélastique", on entend tout  
5 mode de comportement qui n'est pas élastique réversible, c'est à dire tout mode de comportement plastique, plastique dépendant du temps, ou viscoplastique, plastique dépendant de la température, plastique résultant de transformation de phases. Ces calculs  
10 utilisent une modélisation du comportement du matériau sous l'effet des contraintes, représentée par une loi reliant les contraintes aux déformations. De façon classique, on utilise des lois de comportement macroscopiques qui correspondent à des représentations  
15 phénoménologiques des phénomènes de déformation, c'est-à-dire des représentations qui ne tiennent pas compte des phénomènes physiques fondamentaux sous-jacents. De tels modèles ont l'avantage d'utiliser un nombre de variables relativement limité ce qui conduit à des calculs  
20 suffisamment peu volumineux pour pouvoir être utilisés dans les processus de conception industriels. En revanche, ce type de modèle présente l'inconvénient de ne pas permettre de modéliser convenablement l'effet de la microstructure des matériaux sur leurs propriétés, et en  
25 particulier sur les propriétés anisotropes, et plus encore sur l'évolution de ces propriétés anisotropes sous l'effet des sollicitations et des déformations.

Afin de remédier à cet inconvénient, il a été proposé d'utiliser des modèles de comportement de matériaux, dits  
30 "modèles polycristallins", dans lesquels le matériau est représenté par une pluralité de grains ayant la structure cristallographique et les propriétés d'un grain du

matériau. Chaque grain est caractérisé notamment par son orientation et par les systèmes de glissement propres à sa structure cristallographique. Dans ces conditions, le nombre de systèmes de glissements est important puisqu'il va de douze pour un cristal cubique à faces centrées à trente pour un cristal hexagonal compact. De tels modèles ont l'avantage de permettre une représentation fine du comportement du matériau, mais l'inconvénient de nécessiter l'utilisation d'un nombre très important de variables. Ce grand nombre de variables conduit à des temps de calculs absolument prohibitifs qui ne permettent pas l'utilisation de tels modèles dans un contexte industriel. Enfin aucun de ces modèles ne permet de prendre en compte les endommagements microscopiques des matériaux, et donc ces modèles ne permettent pas de prévoir les ruptures en service.

Le but de la présente invention est de remédier à ces inconvénients en proposant un procédé pour déterminer les effets d'une sollicitation mécanique sur un objet constitué d'un matériau solide qui permette de simuler de façon fine l'évolution des propriétés d'un matériau anisotrope, en particulier d'un matériau polycristallin, en utilisant un nombre suffisamment restreint de variables pour que les temps de calcul soient raisonnables et permettent de faire des simulations dans un contexte industriel, tout en permettant de prendre en compte les endommagements du matériau.

A cet effet, l'invention a pour objet un procédé pour déterminer les effets des sollicitations mécaniques sur une pièce constituée d'un matériau solide, selon lequel on calcule les déformations et les contraintes engendrées par la sollicitation mécanique en une pluralité de points

de la pièce au moyen d'une méthode de calcul numérique en mode anélastique, dans lequel le comportement du matériau solide est représenté par un modèle de comportement microscopique polycristallin utilisant une pluralité de  
5 briques "grain" ayant chacune une orientation et une fraction volumique, dont les déformations sont déterminées à partir d'une pluralité de systèmes de glissement propres au matériau solide, la trace du tenseur des déformations plastiques microscopiques de  
10 chaque brique "grain" étant nulle, les orientations distinctes et les fractions volumiques correspondant à des briques "grain" étant représentatives de l'anisotropie du matériau solide. Selon l'invention, le nombre de briques "grains" est inférieur ou égal à dix et  
15 le nombre de systèmes de glissement utilisés dans le modèle est inférieur ou égal à six. En outre, le modèle microscopique polycristallin peut éventuellement utiliser jusqu'à sept briques "joints de grains" ayant chacune une orientation et une fraction volumique, et dont les  
20 déformations sont déterminées à partir d' au moins un système d'ouverture, la trace du tenseur des déformations plastiques microscopiques de chaque brique "joint de grain" étant positive. Le modèle peut également utiliser éventuellement une brique "trou" ayant une fraction  
25 volumique variable, dont les déformations plastiques sont purement volumiques et dont la trace du tenseur des déformations plastiques microscopiques est positive.

De préférence, les six systèmes de glissement associés à une brique "grain" définis dans un repère  
30 orthonormé associé à la brique "grain" définis par les normales au plan de glissement et par les directions de glissement sont tels que le double de la matrice

d'orientation associée à chaque système de glissement n'est constitué que de "0", de "-1" et de "1".

Pour un matériau isotrope à structure cubique les déformations sont déterminées de préférence à partir de  
 5 deux familles de trois systèmes de glissement, une première famille correspondant aux faces du cube cristallin, et la deuxième famille correspondant aux plans de 45° de ces faces. De préférence le nombre de briques "grain" est égal à sept et les briques "grain"  
 10 sont obtenues par symétrisation de deux briques "grain" primitives situées sur les grands cercles à 45° de la figure de pôles.

On peut en outre déterminer l'évolution de la texture du matériau en calculant la rotation  $\underline{Q}$  du réseau  
 15 cristallin de chaque brique "grain" par rapport à un repère corotationnel. Lorsque le matériau est isotrope à structure cubique, le nombre de briques "grain" est alors de préférence égal à dix.

On peut également déterminer l'avancement d'une  
 20 transformation de phase. Pour cela, on peut attribuer à chaque brique "grain", des caractéristiques fonction de l'avancement de la transformation de phase.

D'une façon générale, les orientations et les fractions volumiques des briques "grain" peuvent être  
 25 déterminées par ajustement à partir d'essais de traction biaxiale et de traction torsion.

En l'absence de brique "trou", le modèle de localisation pour le passage du niveau macroscopique au niveau microscopique pour une brique "grain", permettant  
 30 de calculer le tenseur des contraintes microscopiques  $\underline{\sigma}_g$  dans la brique "grain" en fonction du tenseur des



contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}$  et du tenseur  $\underline{\underline{\epsilon}}_g^P$  des déformations plastiques microscopiques dans la brique "grain" et du tenseur  $\underline{\underline{E}}^P$  des déformations plastiques macroscopiques s'écrit :

5

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta) [\eta(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + \alpha \underline{\underline{1}}] (\underline{\underline{E}}^P - \underline{\underline{\epsilon}}_g^P)$$

Dans cette formule  $\alpha$  et  $\eta$  sont deux coefficients dépendant d'une part du matériau et d'autre part de la valeur maximale atteinte au cours de la déformation par le deuxième invariant de von Mises de la déformation plastique macroscopique.

De préférence, lorsque les calculs sont des calculs par éléments finis, on associe une seule brique "grain" et éventuellement une brique "trou" ou une brique "joint de grain" à chacun des points d'intégration de la méthode de calcul par éléments finis ; la répartition des briques entre les points d'intégration de la méthode de calcul étant effectuée de telle sorte que cette répartition soit homogène.

La méthode de calcul par éléments finis utilisée peut être une méthode de calcul mécanique ou thermo-mécanique faisant intervenir le temps.

Dans ce cas, lorsqu'on utilise une brique "trou", la fraction volumique de la brique "trou" n'est pas nulle à l'instant initial des calculs.

Lorsque le nombre de briques "joint de grain" ou de briques "trou" est supérieur ou égal à un, on peut définir un critère tel que, lorsqu'en un point de l'objet le critère est satisfait, on attribue au point considéré

une résistance mécanique du matériau nulle, de façon à simuler la présence d'une fissure.

L'objet en matériau solide est par exemple une pièce métallique soumise à une sollicitation mécanique associée  
5 à une opération de mise en forme par déformation plastique, notamment telle que l'emboutissage, l'étirage, le laminage, le cintrage ou le forgeage. Cette liste de procédés de mise en forme par déformation plastique n'est pas limitative.

10 L'objet peut également être une pièce métallique soumise à une sollicitation mécanique correspondant à l'utilisation de la pièce. L'utilisation de la pièce pouvant engendrer notamment des phénomènes de fluage, de fatigue, ou de fatigue-fluage.

15 Le procédé selon l'invention peut être utilisé pour évaluer l'effet des procédés de mise en forme, tels que l'emboutissage de tôles ou l'extrusion d'un tube, sur les propriétés des matériaux. Les résultats obtenus peuvent être utilisés par exemple dans des modèles de simulation  
20 de tests de résistance aux chocs de véhicules automobiles.

Le procédé selon l'invention peut également être utilisé pour simuler la fabrication de boîtes métalliques telles que des canettes, obtenues par emboutissage, de  
25 façon à en déterminer les propriétés d'emploi en tenant compte des phénomènes tels que les cornes d'emboutissage résultant de l'anisotropie du matériau.

Le procédé selon l'invention peut aussi être utilisé pour simuler la fabrication de tubes d'échangeurs de  
30 chaleur en alliage de nickel pour les générateurs de vapeur ou pour simuler la fabrication de gaines en alliage de zirconium pour combustible de centrales

L'introduction de briques "joint de grain" et de briques "trou" dans le modèle permet de simuler les endommagements microscopiques du matériau et donc de prévoir les ruptures ou les risques de rupture en service. De ce fait, le procédé selon l'invention peut également être utilisé pour étudier le comportement et évaluer la durée de vie des installations. En particulier dans le domaine des centrales nucléaires pour prévoir la durée de vie de composants tels que les cuves, les générateurs de vapeur, les tuyauteries, les gaines de crayons combustibles, tous composants soumis à des charges complexes.

Pour les centrales thermiques classiques, le procédé peut être utilisé pour prévoir la durée de vie d'équipements soumis à des phénomènes de fluage.

Dans l'aéronautique, le procédé peut être utilisé pour la prévision de la durée de vie des disques et des ailettes des réacteurs soumis à des phénomènes de fluage ou de fatigue-fluage. Le fluage est le mode d'endommagement d'une pièce soumise à un chargement maintenu pendant une longue durée. La fatigue est le mode d'endommagement d'une pièce soumise à un grand nombre de cycles de chargement successifs. La fatigue-fluage est la combinaison de ces deux modes d'endommagement, par exemple lorsque les cycles de chargement comportent un maintien de longue durée à contrainte élevée.

Ces utilisations ne sont données qu'à titre d'exemple et l'homme du métier saura adapter le procédé à toute situation particulière faisant intervenir des phénomènes de plasticité ou de fluage.

L'invention va être maintenant décrite plus en détail en regard des figures annexées dans lesquelles :

- la figure 1 représente les six systèmes de glissement utilisés par le modèle polycristallin selon l'invention.
- 5 - la figure 2 représente les six systèmes de glissements utilisés pour représenter le comportement d'un cristal cubique.
- la figure 3 est la figure de pôles des briques "grain" représentant un matériau isotrope.
- 10 - la figure 4 représente les six systèmes de glissement utilisés pour représenter le comportement d'un cristal hexagonal compact.
- la figure 5 est la figure de pôles des briques "joint de grain" d'un modèle d'endommagement intergranulaire.
- 15 - la figure 6 représente l'affectation des briques aux points de Gauss d'un élément de calcul par éléments finis.
- la figure 7 représente l'affectation des briques aux points de Gauss d'un élément d'une coque.
- 20 - la figure 8 est la figure de pôles des briques "grain" utilisées pour représenter la texture d'un matériau initialement isotrope.
- la figure 9 montre les résultats de calculs correspondant à un essai de traction biaxiale sur  
25 un tube en Zircaloy recristallisé.

Alors que dans les modèles de comportement polycristallins connus on utilise autant de systèmes de glissement qu'il en existe dans le cristal réel, de douze à trente selon la nature du cristal, les inventeurs ont  
30 découvert de façon nouvelle qu'une bonne représentation de la déformation d'un cristal pouvait être obtenue en

utilisant seulement six systèmes de glissement distincts bien choisis.

Alors que les modèles polycristallins connus considèrent qu'il est nécessaire d'utiliser autant de grains qu'il y a d'orientations effectives des grains dans le matériau réel, les inventeurs ont découvert de façon nouvelle, qu'il est possible d'obtenir une bonne représentation du comportement du matériau en utilisant un nombre de grains restreint correspondant à au plus dix orientations différentes des grains.

Les inventeurs ont également découvert de façon nouvelle qu'il était possible dans tous les cas de chargement, notamment cycliques, et pour les briques "grains" comme pour les briques "joint de grain", d'obtenir une bonne représentation des matériaux en utilisant des modèles de changement d'échelle permettant de faire le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique et inversement qui ne fasse pas intervenir de tenseur supplémentaire mais qui, à la place de ces tenseurs, utilise des paramètres scalaires.

En outre, les inventeurs ont constaté de façon nouvelle qu'il n'était pas indispensable d'affecter l'ensemble des grains du modèle de comportement à l'ensemble des points de calcul, et dans le cas du calcul par la méthode des éléments finis, à l'ensemble des points d'intégration de la méthode par éléments finis, mais qu'il était possible d'obtenir une précision excellente en affectant un nombre réduit de grains à chacun des points de calculs, et dans le cas de calcul par méthode des éléments finis, un grain à chacun des points de calcul de la méthode considérée.

Enfin, les inventeurs ont découvert de façon nouvelle, qu'il était possible de simuler l'endommagement à l'échelle microscopique en utilisant des modèles de joint de grains simples qui permettent de simuler les  
 5 phénomènes d'endommagement intergranulaires ou d'utiliser des modèles de cavités pour modéliser l'endommagement ductile des matériaux.

Ainsi, l'invention se distingue des méthodes de calcul numérique connues par la nature du modèle de  
 10 comportement polycristallin de matériau, et par la façon de l'incorporer dans la méthode de calcul numérique.

Afin de bien faire comprendre l'invention, on va considérer le cas particulier de la méthode de calcul par éléments finis. On va tout d'abord rappeler quelques  
 15 notions sur les techniques de calculs par cette méthode et sur les modèles de comportement de matériaux de type polycristallin, puis on va expliquer comment, selon l'invention, on construit un modèle de comportement polycristallin performant, et on va indiquer comment on  
 20 incorpore ce modèle de comportement polycristallin dans la méthode de calcul par éléments finis.

De façon classique, pour simuler par un calcul par éléments finis le comportement d'un objet soumis à des sollicitations mécaniques, on construit une  
 25 représentation de l'objet matériel considéré à l'aide d'un maillage, et on identifie les sollicitations mécaniques extérieures auxquelles il va être soumis. Puis de façon connue en elle-même, on calcule par itération, les contraintes et les déformations à des instants  
 30 successifs séparés par un pas de temps  $\Delta t$ . Ces calculs font intervenir un modèle de comportement du matériau.

Dans le cas d'un calcul par éléments finis utilisant un modèle de comportement du matériau du type "modèle polycristallin", à un instant déterminé  $t$ , on connaît pour chacune des mailles du maillage, le tenseur des contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}$  et le tenseur des déformations macroscopiques  $\underline{\underline{E}}$  qu'on peut décomposer en un tenseur des déformations élastiques  $\underline{\underline{E}}^e$  et un tenseur des déformations plastiques  $\underline{\underline{E}}^p$  et pour chacun des grains du modèle polycristallin, le tenseur des déformations plastiques microscopiques  $\underline{\underline{\varepsilon}}_g^p$ .

A l'aide d'un modèle de localisation permettant le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique, on détermine le tenseur des contraintes  $\underline{\underline{\sigma}}_g$  dans chacun des grains du modèle polycristallin.

A l'aide d'un modèle de comportement anélastique tel qu'un modèle plastique ou viscoplastique (de tels modèles sont connus en eux-mêmes de l'homme du métier), et des systèmes de glissement du grain, on détermine le tenseur des vitesses de déformation microscopiques  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_g^p$  de chaque grain.

En intégrant les vitesses de déformations sur un intervalle de temps  $\Delta t$ , on calcule les déformations plastiques microscopiques  $\underline{\underline{\varepsilon}}_g^p$  à l'instant  $t + \Delta t$ .

En utilisant un modèle d'homogénéisation permettant le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, on détermine alors les tenseurs des déformations  $\underline{\underline{E}}$  et des contraintes  $\underline{\underline{\Sigma}}$  macroscopiques à l'instant  $t + \Delta t$ . On peut alors recommencer le calcul et

ainsi déterminer l'évolution au cours du temps des contraintes et des déformations dans l'objet étudié.

Pour mettre en œuvre une méthode de calcul numérique du type de celle qui vient d'être décrite, on utilise  
5 trois repères:

- un repère global, ou repère du laboratoire, ( $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ) qui est absolu et qui sert de référence pour la description de l'objet à étudier. Selon la nature de l'objet étudié, ce repère permet de repérer chaque point  
10 de l'objet par ses coordonnées cartésiennes ou par ses coordonnées cylindriques, ou par ses coordonnées sphériques.

- des repères locaux macroscopiques orthonormés, associés à chacun des points de l'objet étudié. Ainsi, à  
15 chaque point, et en particulier, à chaque point pour lequel on effectue un calcul, on associe un repère local macroscopique. Ce repère est un repère orthonormé dont la position et l'orientation par rapport au repère global peut évoluer au fur et à mesure que l'objet étudié se  
20 déforme.

- des repères locaux microscopiques orthonormés associés à chacune des "briques" du modèle polycristallin et qui servent à décrire les déformations microscopiques de chaque brique. L'orientation du repère local  
25 microscopique d'une "brique" associée à un point de l'objet étudié représente l'orientation de ce grain par rapport au repère local macroscopique du point considéré.

Par la suite on appellera ( $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$ ) un repère local macroscopique et ( $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$ ) un repère local  
30 microscopique.

On va maintenant décrire le modèle polycristallin utilisé dans l'invention.



Selon l'invention, pour construire le modèle polycristallin, on utilise des briques élémentaires de trois natures différentes :

- des briques "grains" qui représentent le  
5 comportement de grains cristallins ;
- les briques "joints de grains" qui représentent le comportement de joints de grains ;
- les briques "trou" qui représentent des cavités.

Les briques "grains" permettent de représenter le  
10 matériau en l'absence d'endommagement microscopique. Les briques "joints de grains" permettent de représenter des endommagements du type intergranulaire. Les briques "trou" permettent de représenter les endommagements du type ductile.

15 On va maintenant décrire d'abord les briques "grains", puis les briques "joints de grains" et enfin les briques "trous".

De façon connue, à chaque brique "grain" qui est l'équivalent des "grains" utilisés dans les modèles  
20 polycristallins connus, on associe des systèmes de glissements, des lois de comportement du matériau pour chacun des systèmes de glissement, une orientation de la brique "grain" par rapport à un repère lié à l'objet que l'on veut étudier, et enfin une fraction volumique  $f$ .

25 Selon l'invention, et quelle que soit la nature cristallographique du matériau solide considéré, on attribue à la brique "grain" six systèmes de glissement. De façon connue, chaque système est défini par la normale à un plan de glissement et par une direction de  
30 glissement, ce qui permet d'associer à chaque système de glissement une matrice d'orientation. Dans un repère local microscopique orthonormé  $(x_1, x_2, x_3)$  lié à la

brique "grain", selon l'invention, on choisit les systèmes de glissement de telle sorte que les doubles des matrices d'orientation,  $\underline{\underline{m}}_s$ , des systèmes de glissement ne soient constitués que de 0, 1, -1.

- 5 Si  $\underline{n}_s$  est le vecteur normal au plan du système de glissement d'indice  $s$ , et  $\underline{l}_s$  le vecteur de la direction de glissement de ce système de glissement, on a par définition :

$$2 \underline{\underline{m}}_s = (\underline{n}_s \otimes \underline{l}_s + \underline{l}_s \otimes \underline{n}_s)$$

- 10 Avec ces définitions, les systèmes de glissement, représentés à la figure 1, sont les suivants :

$$\begin{aligned} s = 1 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$2 \underline{\underline{m}}_s = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} s = 2 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$2 \underline{\underline{m}}_s = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} s = 3 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$2 \underline{\underline{m}}_s = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 s = 4 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\
 \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\
 2 \underline{m}_s &= \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \\
 s = 5 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
 \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
 2 \underline{m}_s &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \\
 s = 6 \quad \underline{n}_s &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
 \underline{l}_s &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
 2 \underline{m}_s &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}
 \end{aligned}$$

A la figure 1, on a représenté un cube ABCDEFGH dans le repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$ .

Le système de glissement  $s=1$ , correspond à un  
 5 glissement selon le vecteur  $\underline{l}_1$ , parallèle à l'axe  $x_2$ , dans un plan tel que le plan CDEH qui est perpendiculaire au vecteur  $\underline{n}_1$  et parallèle au plan  $(x_2, x_3)$ .

Les systèmes de glissement  $s=2$  et  $s=3$ , sont comparables au système  $s=1$ , et correspondent à des  
 10 glissements parallèles aux axes  $x_3$  et  $x_1$ , le long de plans parallèles aux plans  $(x_3, x_1)$  et  $(x_1, x_2)$ , respectivement.

Le système de glissement  $s=4$  correspond à un glissement selon le vecteur  $\underline{l}_4$  parallèle à la diagonale DF du carré ADEF situé dans le plan  $(x_1, x_2)$ , le glissement  
 15 se faisant dans un plan tel que le plan DFGC perpendiculaire au vecteur  $\underline{n}_4$ . Ce plan est parallèle à

l'axe  $x_3$  et forme un angle de  $45^\circ$  avec les plans  $(x_1, x_3)$  et  $(x_2, x_3)$ .

Les systèmes de glissement  $s=5$  et  $s=6$  sont comparables au système  $s=4$  et correspondent à des glissements parallèles aux diagonales FB et BD, le long des plans FBCE et BDEG, respectivement. Ces plans sont parallèles aux axes  $x_1$  et  $x_2$  respectivement, et forment des angles de  $45^\circ$  avec les plans  $(x_2, x_1)$  et  $(x_3, x_1)$  pour l'un, et avec les plans  $(x_1, x_2)$  et  $(x_3, x_2)$  pour l'autre.

Avec de tels systèmes de glissement, si  $\dot{\gamma}_s$  représente la vitesse de glissement dans la direction  $\underline{l}_s$  du système de glissement  $s$ , le tenseur des vitesses de déformation plastiques de la brique "grain" s'écrit :

15

$$\underline{\dot{\varepsilon}}^P = \sum_s (\underline{m}_s \dot{\gamma}_s) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_6 - \dot{\gamma}_4 & \dot{\gamma}_1 & \dot{\gamma}_3 \\ \dot{\gamma}_1 & \dot{\gamma}_4 - \dot{\gamma}_5 & \dot{\gamma}_2 \\ \dot{\gamma}_3 & \dot{\gamma}_2 & \dot{\gamma}_5 - \dot{\gamma}_6 \end{pmatrix}$$

Pour déterminer les vitesses de glissement  $\dot{\gamma}_s$  sur chacun des systèmes de glissement  $s$ , on utilise un modèle de comportement qui utilise les relations de viscoplasticité classiques décrites par exemple dans La Revue Européenne des éléments finis Vol 3 - n°4/1994, pages 515 à 541. Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. Georges Cailletaud - Philippe Pilvin et qui font intervenir de façon connue la scission résolue  $\tau_s$  sur le système  $s$ . La scission résolue  $\tau_s$  s'écrivant :

25

$$\tau_s = \underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{m}}_s$$

Dans cette équation,  $\underline{\underline{\sigma}}_g$  est le tenseur des contraintes dans le grain considéré.

Pour modéliser le comportement d'un matériau déterminé, il faut alors choisir des briques "grain" du modèle polycristallin de telle sorte que ces briques représentent d'une part le comportement d'un grain du matériau, compte-tenu de sa nature cristallographique réelle et d'autre part d'un agrégat de tels grains, compte-tenu de la répartition réelle des orientations des grains dans le matériau, c'est-à-dire de la texture du matériau.

Pour faire ce choix, on associe à chaque système de glissement une scission critique telle que la brique "grain" obtenue ait un comportement identique à celui du cristal réel dont est constitué le matériau, puis on choisit le nombre de briques "grains", leurs orientations et leurs fractions volumiques de telle sorte que l'agrégat obtenu ait un comportement bien représentatif du matériau réel.

Pour représenter l'orientation des grains, on considère un repère local macroscopique  $(X_1, X_2, X_3)$  et un repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$  lié à chaque brique "grain". L'orientation d'une brique "grain" est définie comme étant l'orientation de son repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$  par rapport au repère local macroscopique  $(X_1, X_2, X_3)$ .

De façon connue en elle-même, on considère que le repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$  se déduit du repère local macroscopique  $(X_1, X_2, X_3)$  par trois rotations :

- une rotation d'angle  $\psi$  du repère  $(X_1, X_2, X_3)$  autour de l'axe  $X_3$  qui conduit à un repère  $(X'_1, X'_2, X_3)$ ;

- une rotation d'angle  $\phi$  autour de l'axe  $X'_1$  qui conduit à un repère  $(X'_1, X''_2, X'_3)$

5     - une rotation d'angle  $\phi$  du repère  $(X'_1, X''_2, X'_3)$  autour de l'axe  $X'_3$  qui conduit à un repère  $(X''_1, X''_2, X'_3)$  ; ce dernier repère est le repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$ .

Le repère local microscopique  $(x_1, x_2, x_3)$  est donc  
10 défini par les trois angles de rotation  $\Psi, \phi, \phi$ , qui ont permis de l'obtenir. Ces angles, sont habituellement appelés "angles d'Euler".

Cette méthodologie de choix des briques "grains" va être illustrée par deux exemples que l'homme du métier  
15 saura transposer à tout cas particulier.

Le premier exemple, concerne le cas d'un matériau isotrope constitué de cristaux de structure cubique centrée ou faces-centrées tels que les aciers.

Lorsque le matériau est constitué de cristaux de  
20 structure cubique, les systèmes de glissements peuvent être regroupés en deux sous-familles correspondant chacune à une scission critique. Ces deux familles de systèmes de glissement correspondent d'une part aux glissements sur les faces du cube, et d'autre part aux  
25 glissements sur les plans à  $45^\circ$  de ces faces.

Ces six systèmes de glissement adaptés à un cristal cubique sont représentés à la figure 2. Les systèmes  $s=1$ ,  $s=2$  et  $s=3$ , correspondent aux glissements sur les faces du cube et correspondent à la même scission critique,  
30 puisque, hormis l'orientation, ces faces sont identiques. Les systèmes  $s=4$ ,  $s=5$  et  $s=6$ , correspondent aux

glissements sur les plans à  $45^\circ$  par rapport aux trois directions des arêtes du cube. Ces trois systèmes correspondent à la même scission critique, puisque, hormis l'orientation, ces plans sont identiques.

5        Afin de bien représenter le caractère isotrope du matériau, on considère un modèle constitué de sept briques grains dont les orientations sont choisies de façon à couvrir au mieux une sphère.

10        On utilise alors 7 briques "grain" choisies de telle sorte que la figure de pôles correspondante soit symétrique.

Pour cela, on construit un premier groupe de trois briques "grain" et un deuxième groupe de quatre briques "grain" en procédant comme suit :

15        - pour le premier groupe, on considère une première brique "grain" primitive d'indice  $g=1$ , obtenue par une rotation d'angle  $\Psi=\pi/4$  autour de l'axe  $X_3$ . Pour obtenir un comportement identique selon les trois axes, on symétrise la figure de pôles en ajoutant deux briques  
20        "grain" d'indice  $g=2$  et  $g=3$  obtenues par rotation de  $\pi/4$  autour des axes  $X_1$  et  $X_2$  respectivement. Les coordonnées des pôles de ces grains sont alors  $0, \pm 1, \pm 1/\sqrt{2}$  et  $\pm (\sqrt{2}-1)$ .

25        - pour le deuxième groupe, on considère une deuxième brique "grain" primitive dont les pôles sont situés sur trois grands cercles passant par un des axes  $X_i$  et formant un angle de  $45^\circ$  avec les deux autres axes, et dont les coordonnées sont  $\pm 0,2, \pm 0,4$  et  $\pm 0,5$ . Puis on symétrise la figure de pôles en ajoutant trois briques  
30        "grains" dont les pôles se déduisent des pôles de la

deuxième brique "grain" primitive par symétrie par rapport aux axes  $X_1$ ,  $X_2$  et  $X_3$ .

On obtient ainsi sept briques "grains" auxquelles on attribue la fraction volumique  $f = 1/7$  et dont les angles,  $\Psi$ ,  $\phi$ , et  $\varphi$ , exprimés en radians, sont :

grains:	1	2	3	4	5	6	7
$\Psi$	$\pi/4$	0	$\pi/2$	0,464	$\pi/4$	2,034	-2,678
$\phi$	0	$\pi/4$	$\pi/4$	0,841	1,231	0,841	0,841
$\varphi$	0	0	$-\pi/2$	0,464	$-\pi/4$	-1,107	2,034

Les sens de deux des trois axes  $x_1$ ,  $x_2$  et  $x_3$  peuvent être inversés, et les trois axes peuvent être soumis à une permutation circulaire sans modifier les résultats du modèle. Les angles du tableau correspondent à un choix particulier des sens des axes et de la permutation.

La figure de pôles obtenue est représentée à la figure 3. Sur cette figure, les pôles repérés  $1_1$ ,  $1_2$ ,  $1_3$  représentent les pôles de la première brique "grain". Les pôles repérés  $2_1$ ,  $2_2$ ,  $2_3$  représentent les pôles de la deuxième brique "grain", et ainsi de suite. On voit en particulier que les pôles  $4_3$ ,  $5_2$ ,  $6_1$  et  $7_3$  ont pour coordonnées  $(\pm 0,5 ; \pm 0,5)$ . Les pôles  $4_1$ ,  $4_2$ ,  $5_1$ ,  $5_3$ ,  $6_2$ ,  $6_3$ ,  $7_1$  et  $7_2$  ont pour coordonnées  $(\pm 0,2$  ou  $\pm 0,4)$ .

Ce modèle est universel pour les matériaux isotropes à structure cubique centrée ou faces-centrées.

A titre de deuxième exemple, on considère un matériau anisotrope ayant une structure hexagonale compacte. Un



tel matériau est par exemple du Zircaloy recristallisé. Pour une telle structure cristallographique hexagonale, on considère trois groupes de systèmes de glissement correspondant à trois scissions critiques distinctes. Le premier groupe rassemble les systèmes 2 et 3 qui correspondent au glissement basal, le deuxième groupe rassemble les systèmes 1 et 4 qui correspondent au glissement prismatique, et le troisième groupe rassemble le système 5 et 6 qui correspondent aux glissements pyramidaux.

Les systèmes de glissement destinés à représenter un cristal hexagonal compact sont représentés à la figure 4. Sur cette figure, les axes  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  constituent le repère orthogonal de référence de la brique "grain", c'est-à-dire le repère local microscopique. Le prisme à base hexagonale A B C D E F G H I J K L est une structure qui dans le cadre du modèle a un comportement identique à celui d'un cristal hexagonal, mais n'a pas la même géométrie que celle d'un cristal de structure hexagonale.

Les systèmes de glissement :

- $s=2$  repéré  $P_2$  sur la figure, et  $s=3$ , repéré  $B_3$  correspondent au glissement basal ; il leur est attribué une première valeur de scission critique ;
- $s=1$  repéré  $P_1$  et  $s=4$  repéré  $P_4$ , correspondent au glissement prismatique ; il leur est attribué une deuxième valeur de scission critique ou deux valeurs distinctes.
- $s=5$  repéré  $\pi_5$  et  $s=6$  repéré  $\pi_6$ , correspondent aux glissements pyramidaux ; il leur est attribué une valeur de la scission critique particulière.

En outre, il est nécessaire de choisir un certain nombre de briques "grains" ayant des orientations permettant de représenter l'anisotropie globale du matériau. Dans le deuxième exemple, qui concerne en particulier un tube en Zircaloy recristallisé, l'invention utilise six briques "grains" ayant chacune une fraction volumique de  $1/6$ , dont les orientations par rapport au repère local macroscopique  $(X_1, X_2, X_3)$  lié au point de l'objet considéré, sont les suivantes :

10

$g =$	1	2	3	4	5	6
$\Psi =$	0	$\pi/2$	$\Psi_1$	$\pi - \Psi_1$	$\Psi_2$	$\pi - \Psi_2$
$\phi =$	$\pi/2$	$\pi/2$	$\pi/2$	$\pi/2$	$\pi/2$	$\pi/2$
$\varphi =$	$\varphi_1$	$\varphi_2$	$\varphi_3$	$\varphi_3$	0	0

Les orientations de ces six grains dépendent de cinq paramètres qui correspondent à cinq angles d'Euler  $\Psi_1, \Psi_2, \varphi_1, \varphi_2$  et  $\varphi_3$ . Ces cinq paramètres peuvent être déterminés par une méthode d'identification numérique en comparant les résultats de calcul numérique à des résultats d'essais de traction-torsion. Ces méthodes d'identification numérique sont des méthodes connues de l'homme du métier.

20

Pour modéliser l'évolution de la texture d'un matériau polycristallin, c'est-à-dire l'évolution des orientations des grains, on considère de façon connue la rotation  $\underline{Q}$  du réseau cristallin d'un grain par rapport à un repère dit "corotationnel". La vitesse de rotation du réseau cristallin est donnée par :

25

$$\dot{\underline{\underline{Q}}} : \underline{\underline{Q}}^T = - \sum_{s=1}^N \underline{\underline{q}}_s \dot{\gamma}_s$$

où apparaît le tenseur de rotation :

$$\underline{\underline{q}}_s = (\underline{\underline{l}}_s \otimes \underline{\underline{n}}_s - \underline{\underline{n}}_s \otimes \underline{\underline{l}}_s) / 2$$

Le repère corotationnel suit la rotation moyenne de  
 5 la matière  $\underline{\underline{R}}$ . De façon connue, sa vitesse de rotation par rapport au repère du laboratoire ( $L_1, L_2, L_3$ ) est calculée à partir des gradients des vitesses  $\underline{\underline{v}}$  des points matériels du corps solide déformable :

$$\dot{\underline{\underline{R}}} : \underline{\underline{R}}^T = (\underline{\underline{grad}} \underline{\underline{v}} - \underline{\underline{grad}}^T \underline{\underline{v}}) / 2$$

10 Dans l'exemple du matériau initialement isotrope constitué de 7 briques "grain", il peut être intéressant, pour certaines géométries de pièces et certains chargements particuliers comme le laminage d'une tôle, de maintenir une symétrie orthotrope après évolution de la  
 15 texture. Pour cela et de façon nouvelle, on dissocie les grains 1 à 3, obtenus par rotation de  $\pi/4$  autour des trois axes  $X_3, X_1$  et  $X_2$  du repère local macroscopique, en six grains obtenus par des rotations de  $\pi/8$  (grains 1 à 3) et  $3\pi/8$  (grains 8 à 10) autour de ces axes. De plus,  
 20 les axes  $x_2$  et  $x_3$  du repère à l'échelle microscopique du grain 8 sont inversés, les axes  $x_1$  et  $x_3$  du grain 9 sont inversés et les axes  $x_1$  et  $x_2$  du grain 10 sont inversés, ce qui est équivalent à des rotations d'angle  $\pi$  autour des axes  $x_1, x_2$  et  $x_3$  respectivement pour les grains 8, 9  
 25 et 10. On obtient ainsi dix briques "grains", dont les angles d'Euler  $\psi, \phi$  et  $\varphi$  et les fractions volumiques  $f$  sont :

grains	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\psi$	$\pi/8$	0	$\pi/2$	0,464	$\pi/4$	2,034	-2,678	$3\pi/8$	0	$\pi/2$
$\phi$	0	$\pi/8$	$\pi/8$	0,841	1,231	0,841	0,841	$\pi$	$11\pi/8$	$3\pi/8$
$\varphi$	0	0	$-\pi/2$	0,464	$-\pi/4$	-1,107	2,034	0	$\pi$	$\pi/2$
f	1/14	1/14	1/14	1/7	1/7	1/7	1/7	1/14	1/14	1/14

La figure de pôles obtenue dans l'état initial, avant évolution de texture, est représentée à la figure 8. Pour obtenir une figure de pôles orthotrope après évolution de texture, les dix briques "grains" 1 à 10 peuvent être complétées par dix briques "grains" obtenues en substituant les unes aux autres les normales aux plans de glissement  $\underline{n}$ , et les directions de glissement  $\underline{l}$ , des 6 systèmes de glissement, ce qui revient à conserver les tenseurs d'orientation  $\underline{m}_s$ , et à inverser les tenseurs de rotation  $\underline{q}_s$ .

On va maintenant décrire les briques "joint de grains", destinées à modéliser les endommagements intergranulaires liés à l'ouverture des joints de grains.

Pour modéliser les endommagements intergranulaires, on utilise des briques "joint de grains" dont le comportement est représenté par au moins un système d'ouverture et éventuellement au moins un système de glissement.

Un système d'ouverture se distingue d'un système de glissement par le fait qu'il conduit à un tenseur de déformations plastiques dont la trace est positive.

Comme pour les briques "grains", les systèmes d'ouverture ou de glissement sont définis par des matrices d'orientation  $\underline{m}_s$  se déduisant des normales aux plans de déformation (glissement ou ouverture)  $\underline{n}_s$  et des directions de déformation  $\underline{l}_s$ .

A titre d'exemple, on considère les deux cas suivants :

1) la brique "joint de grain" comporte un système d'ouverture ( $s=1$ ) et deux systèmes de glissement intergranulaire ( $s=2$  et  $s=3$ ). Ces systèmes sont définis de la façon suivante :

$$\begin{array}{l}
 s = \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 2 \quad \quad \quad 3 \\
 \underline{n}_s = \quad (1 \ 0 \ 0) \quad (1 \ 0 \ 0) \quad (1 \ 0 \ 0) \\
 \underline{l}_s = \quad (1 \ 0 \ 0) \quad (0 \ 1 \ 0) \quad (0 \ 0 \ 1) \\
 \\
 2 \ \underline{m}_s = \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

2) La brique "joint de grain" comprend trois systèmes d'ouverture ( $s=1, s=2, s=3$ ) et trois systèmes de glissement intergranulaire ( $s=4, s=5, s=6$ ) :

$$\begin{array}{l}
 s = \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 2 \quad \quad \quad 3 \\
 \underline{n}_s = \quad (1 \ 0 \ 0) \quad (0 \ 1 \ 0) \quad (0 \ 0 \ 1) \\
 \underline{l}_s = \quad (1 \ 0 \ 0) \quad (0 \ 1 \ 0) \quad (0 \ 0 \ 1)
 \end{array}$$

$$2 \quad \underline{\underline{m}}_s = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\underline{s} = \begin{matrix} & 4 & & 5 & & 6 \\ \underline{n}_s = & (1 & 0 & 0) & (0 & 1 & 0) & (0 & 0 & 1) \end{matrix}$$

$$\underline{l}_s = \begin{matrix} (0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2}) & (1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2}) & (1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0) \end{matrix}$$

$$2 \quad \underline{\underline{m}}_s = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

Le choix des briques "joint de grain" dépend de la nature des sollicitations auxquelles est soumis l'objet dont on veut étudier le comportement.

Lorsque l'objet dont on veut étudier le comportement est soumis à des sollicitations dans une seule direction, X1, on peut considérer une seule brique "joint de grain" perpendiculaire à la direction X1, dont le système d'ouverture correspond à la direction X1 et les deux autres systèmes de glissement correspondent à X2 et X3.

Pour un chargement dans une direction quelconque, on peut soit utiliser trois briques "joint de grain" perpendiculaires à chacune des directions X1, X2, X3, soit utiliser une seule brique "joint de grain" comportant trois systèmes d'ouverture et trois systèmes de glissement.

Enfin pour la description fine de l'endommagement par une sollicitation multiaxiale, on peut considérer sept briques "joint de grain" ayant chacune un système

d'ouverture et deux systèmes de glissement, et une orientation définie par les deux angles d'Euler de la normale  $\underline{n}$  du système d'ouverture.

Les orientations des directions d'ouverture des briques "joint de grain" peuvent être représentées par une figure de pôles reproduite à la figure 5, dans laquelle les sept orientations sont repérées 1, 2, 3, 4, 5, 6 et 7.

Les fractions volumiques des briques "joint de grain" sont choisies de telle sorte que leur fraction volumique totale soit égale à six fois le rapport de l'épaisseur mécanique du joint de grain à son diamètre. A titre indicatif, cela représente quelques pour-cent.

Pour décrire le comportement des joints de grains, on utilise des modèles visco-plastiques classiques qui permettent de déterminer les vitesses d'ouverture des joints de grain. Ces modèles sont par exemple les modèles décrits par Onck et Van der Giessen dans Journal of the Mechanics and Physics of Solids-Vol 47, 1999, pages 99-139-"Growth of an initially sharp crack by grain boundary cavitation".

On va maintenant décrire une brique "trou", destinée à modéliser l'endommagement ductile. Une telle brique "trou" est caractérisée par une vitesse de déformation plastique purement volumique représentée par les équations :

$$\dot{\varepsilon}_m^p = 1/3 D_1 \exp \left[ \frac{\Sigma_m}{\rho \sigma_1} \right] \dot{E}_{eq}^p$$

$$\rho = \exp(-3E_m^p)$$

$$\dot{E}_m^p = f \dot{\epsilon}_m^p$$

$$f = 1 - (1 - f_0) \exp(-3E_m^p)$$

dans lesquelles :

$D_1$  et  $\sigma_1$  sont des coefficients scalaires caractéristiques du matériau,

5  $\dot{\epsilon}_m^p$  est la vitesse de déformation plastique volumique microscopique.

$\Sigma_m$  est la contrainte macroscopique moyenne, égale au 1/3 de la trace du tenseur des contraintes.

10  $E_{eq}^p$  est la vitesse de déformation plastique macroscopique équivalente, au sens de von Mises.

$E_m^p$  est la vitesse de déformation plastique macroscopique moyenne.

$f_0$  est la fraction volumique initiale de la brique "trou"

15  $f$  est la fraction volumique de la brique "trou" à l'instant  $t$ .

$\rho$  est la masse volumique relative.

Cette brique "trou" a une fraction volumique  $f$  qui est une variable. Quand on ajoute une brique "trou" à un modèle constitué de briques "grain" de fraction volumique  
20  $f_g$  chacune, on considère que la fraction volumique de chaque brique "grain" devient  $(1-f) f_g$ .

Les différentes briques "grain", "joint de grain" et "trou" qui viennent d'être décrites, permettent de



modéliser le comportement microscopique du matériau. Mais, comme on l'a vu précédemment pour modéliser le comportement d'un objet, il est nécessaire de pouvoir passer du niveau microscopique au niveau macroscopique et  
 5 réciproquement. Pour cela, on utilise des modèles appelés "modèles de changement d'échelle" dont le principe général est connu de l'homme du métier, mais qui, dans le cadre de la présente invention, comportent des particularités qu'on va décrire maintenant.

10 On considère trois situations selon que le modèle ne comporte que des briques "grain", que le modèle comporte des briques "grain" et des briques "joints de grain" ou que le modèle comporte des briques "grains" et une brique "trou".

15 Lorsque le modèle ne comporte que des briques "grains", les relations permettant le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique et inversement sont respectivement :

a) pour le passage de l'échelle macroscopique à  
 20 l'échelle microscopique :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2 \mu (1-\beta) \alpha (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p)$$

avec :

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + D (\underline{\underline{E}}^p)_{eq}^{max}$$

et

25 
$$\beta = \frac{2}{15} \frac{4-5\nu}{1-\nu}$$

Dans ces équations,

$\underline{\underline{\sigma}}_g$  est le tenseur des contraintes microscopiques dans la brique "grain" d'indice g.

$\underline{\underline{\Sigma}}$  est le tenseur des contraintes macroscopiques.

$\underline{\underline{E}}^p$  est le tenseur des déformations plastiques macroscopiques.

$\underline{\underline{\varepsilon}}_g^p$  est le tenseur des déformations microscopiques dans la brique "grain" d'indice g.

$\mu$  est le module de cisaillement du matériau.

$\nu$  est le coefficient de Poisson du matériau.

D est un paramètre propre au matériau, ajustable à partir d'essais.

10  $\left(\underline{\underline{E}}^p\right)_{eq}^{\max}$  est la valeur maximale du deuxième invariant de von Mises du tenseur des déformations plastiques macroscopiques, atteinte antérieurement.

b) Pour le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique :

15 
$$\underline{\underline{\Sigma}} = \sum_{g=1}^N (f_g \underline{\underline{\sigma}}_g)$$

$$\underline{\underline{E}}_p = \sum_{g=1}^N (f_g \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p)$$

$$\dot{\underline{\underline{E}}}_p = \sum_{g=1}^N (f_g \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_g^p)$$

$$\underline{\underline{E}}^e = \frac{1}{2\mu} \left\{ 1 - \left\{ \frac{\nu}{1+\nu} 1 \otimes 1 \right\} \right\} \cdot \underline{\underline{\Sigma}}$$

dans ces équations,

20  $f_g$  est la fraction volumique de la brique "grain" d'indice g,

$\underline{\underline{E}}^e$  est le tenseur des déformations élastiques macroscopiques.

niveau macroscopique au niveau microscopique et du passage du niveau microscopique au niveau macroscopique sont modifiées de la façon suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta) \left[ \eta(\underline{1} \otimes \underline{1}) + \alpha \underline{1} \right] (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p)$$

5 avec

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + D(\underline{\underline{E}}^p)_{eq}^{\max}$$

et

$$\frac{1}{\eta} = 2 + 5D(\underline{\underline{E}}^p)_{eq}^{\max}$$

10 Enfin, lorsque le modèle comporte des briques "grains" et une brique "trou", les relations de passage du niveau macroscopique au niveau microscopique et inversement sont les suivantes :

15 a) pour le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \frac{1}{1-f} \underline{\underline{\Sigma}} + D_1 f \sigma_1 \exp \left[ \frac{\underline{\underline{\Sigma}}_m}{\rho \sigma_1} \right] \frac{\underline{\underline{\Sigma}}}{\underline{\underline{\Sigma}}_{eq}} + 2\mu(1-\beta) \alpha \left( \sum_{h=1}^N (f_h \underline{\underline{\varepsilon}}_h^p) - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p \right)$$

et

$$\underline{\underline{\sigma}}_0 = -(1-f) D_1 \sigma_1 \exp \left[ \frac{\underline{\underline{\Sigma}}_m}{\rho \sigma_1} \right] \frac{\underline{\underline{\Sigma}}}{\underline{\underline{\Sigma}}_{eq}}$$

20  $\underline{\underline{\sigma}}_0$  est le tenseur des contraintes microscopiques dans la brique "trou".

$D_1$  et  $\sigma_1$  sont des paramètres propres au matériau.

b) et pour le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique :

25

$$\underline{\underline{\Sigma}} = f \underline{\underline{\sigma}}_0 + (1-f) \sum_{g=1}^n (f_g \underline{\underline{\sigma}}_g)$$

$$\underline{\underline{\dot{E}}}^p = f \underline{\underline{\dot{e}}}^p_1 + (1-f) \sum_{g=1}^N (f_g \underline{\underline{\dot{e}}}^p_g)$$

$$\underline{\underline{\dot{e}}}^p_g = \sum_s (\underline{\underline{m}}^g_s) \dot{\gamma}^g_s$$

5 Les briques telles qu'elles ont été définies plus haut, associées aux modèles de localisation qui viennent d'être décrits, constituent le modèle polycristallin. Ce modèle permet de calculer l'effet de sollicitations mécaniques sur un objet, mais pour cela il doit être  
10 intégré à un modèle de calcul par éléments finis.

On va maintenant décrire l'intégration du modèle polycristallin de comportement du matériau dans un modèle de calcul par éléments finis.

On va tout d'abord décrire le cas d'un calcul sans  
15 endommagement, c'est-à-dire dans lequel le modèle de comportement ne comporte que des briques "grains". Dans un tel modèle, le nombre de briques "grains" étant faible, on affecte une seule brique "grain" à chaque point de discrétisation du calcul de structure par  
20 éléments finis. Les briques "grains" sont affectées aux points de Gauss, qui sont les points d'intégration dans le calcul par éléments finis. En chacun de ces points, le nombre de briques "grains" étant égal à un, seules les relations scalaires du comportement des briques "grains"  
25 sont utilisées. De plus, les vitesses de déformation plastique macroscopiques sont confondues avec celles des briques "grain". Il en est de même de la contrainte macroscopique qui est égale à la contrainte dans la brique "grain" et de la déformation macroscopique qui est

égale à la déformation dans la brique "grain". Il en résulte que les relations de localisation et d'homogénéisation du modèle de changement d'échelle deviennent inutiles.

5        Afin de bien représenter la structure du matériau et en particulier son homogénéité dans l'espace, les briques "grain" sont affectées aux points d'intégration du maillage de la structure au moyen d'un algorithme garantissant une permutation au sein d'un même élément

10    fini et entre les éléments finis voisins. Ainsi, les briques "grain" sont réparties de façon analogue aux grains du matériau réel. Un exemple de répartition est donné à la figure 6 correspondant au cas d'un matériau à structure cubique tel que décrit précédemment. Cette

15    figure représente un élément fini repéré généralement par 10 comportant six faces en forme de quadrilatère. Les sommets et les milieux des arêtes correspondent à des nœuds du modèle repérés 11, ce qui fait vingt nœuds. Les points d'intégration ou points de Gauss, repérés 12, sont

20    situés à l'intérieur de l'élément fini. Les briques "grain" correspondant aux sept orientations sont réparties comme l'indiquent les chiffres 1 à 7 associés aux points de Gauss. Dans le cas où l'objet étudié est une plaque ou une coque on représente cet objet par

25    plusieurs couches d'épaisseur identique avec trois points d'intégration en milieu et en limite de chaque couche, ce qui conduit à un nombre de points d'intégration égal à  $2p + 1$ . Comme on utilise de trois à cinq couches le nombre de points d'intégration est de sept, neuf ou onze. Ainsi,

30    la plaque ou la coque comporte toutes les briques "grain" du modèle dans son épaisseur, comme un matériau réel. Une permutation garantit une bonne représentation du matériau

réel dans les directions tangentes à la plaque ou à la coque. Une permutation garantit également une bonne représentation moyenne du matériau réel dans l'épaisseur de la plaque ou de la coque. La répartition des briques "grain" est représentée à la figure 7. L'élément fini 20, comporte trois couches 21, 22 et 23. Les points d'intégration sont regroupés en quatre ensembles 24, 25, 26 et 27 comportant chacun sept briques "grain" dont les orientations sont repérées de 1 à 7. Dans certains cas il peut être intéressant d'affecter plusieurs briques "grain" à un des points d'intégration voire toutes les briques "grain" du modèle à chaque point d'intégration. Dans ce cas, les calculs sont un peu plus longs.

En particulier, dans le calcul par éléments finis avec évolution de texture utilisant les dix briques "grain" précédemment définies pour un matériau initialement isotrope, on affecte à certains points d'intégration deux briques "grains" correspondant aux grains dissociés 1 et 8, 2 et 9, 3 et 10. Si l'on utilise les dix briques "grains" supplémentaires obtenues en substituant les normales aux plans de glissement  $n_i$  et les directions de glissement  $l_i$ , on affecte ces briques aux mêmes points d'intégration que les briques 1 à 10. Le nombre de comportements distincts des points d'intégration reste ainsi limité à sept, comme dans le cas d'un calcul sans évolution de texture pour un matériau isotrope.

Lorsqu'on considère le cas dans lequel les joints peuvent être endommagés, c'est-à-dire lorsqu'on utilise un modèle comportant des briques "joint de grain", les fractions volumiques des briques "joint de grain" étant

très faibles, pour obtenir une bonne représentation du matériau on associe une brique "grain" et une brique "joint de grain" à chaque point d'intégration du modèle de calcul par éléments finis, et on utilise un algorithme de permutation de telle sorte que les couples brique "grain"/brique "joint de grain" ne soient pas toujours les mêmes. Dans ce cas, les relations de changement d'échelle restent nécessaires mais sont très simplifiées.

Ces relations sont :

$$10 \quad \underline{\underline{\Sigma}} = f_g \underline{\underline{\sigma}}_g + f_j \underline{\underline{\sigma}}_j$$

$$\underline{\underline{E}}^p = f_g \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p + f_j \underline{\underline{\varepsilon}}_j^p$$

$$f_g + f_j = 1$$

$$15 \quad \underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu (1-\beta) [\eta(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + \alpha \underline{\underline{1}}] f_j (\underline{\underline{\varepsilon}}_j^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_j = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu (1-\beta) [\eta(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + \alpha \underline{\underline{1}}] f_g (\underline{\underline{\varepsilon}}_g^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_j^p)$$

Dans le cas où l'on veut modéliser l'endommagement ductile, c'est-à-dire lorsqu'on utilise un modèle comportant des briques "grain" et une brique "trou", on associe une brique "grain" et une brique "trou" à chacun des points d'intégration. Dans ce cas également, les relations de localisation sont très simplifiées et ces relations sont :

$$25 \quad \underline{\underline{E}}_{der}^p = (1-f) \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p$$

$$\underline{\underline{E}}_m^p = f \underline{\underline{\varepsilon}}_{0m}^p$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \frac{1}{1-f} \underline{\underline{\Sigma}} + D_1 \rho \sigma_1 \exp\left(\frac{\underline{\underline{\Sigma}}_m}{\rho \sigma_1}\right) \frac{\underline{\underline{\Sigma}}}{\underline{\underline{\Sigma}}_{eq}}$$

Avec ce modèle, il est alors possible de calculer l'évolution entre un instant 0 et un instant  $t$ , des propriétés du matériau dont est constitué l'objet pour lequel on fait l'étude des contraintes et des déformations à l'état macroscopique. Cependant, pour faire un tel calcul, il est nécessaire de pouvoir déterminer les différents paramètres qui interviennent dans le modèle.

Pour déterminer ces paramètres, une méthode d'identification connue en elle-même, selon laquelle on commence d'abord par rassembler dans une base de donnée relative au matériau des résultats d'essais de traction, d'essais traction/torsion ou encore d'autres essais mécaniques tels que des essais de fluage. Puis on simule par le calcul les différents essais de la base de donnée en utilisant des valeurs a priori des paramètres. Puis on compare les résultats de ces simulations aux essais proprement dits et, en fonction de l'écart entre les résultats expérimentaux et les résultats calculés, on déduit de nouvelles valeurs pour les paramètres. Enfin, on reproduit ce processus jusqu'à ce que les écarts entre les résultats expérimentaux et les résultats simulés soient inférieurs à une valeur définie à l'avance.

A titre d'exemple, on a appliqué le modèle selon l'invention au cas d'un tube en Zircaloy recristallisé soumis à un effort de traction biaxée. Dans le repère du Laboratoire ( $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ), on a utilisé des coordonnées cylindriques.

Le modèle a été identifié sur la base de deux essais de traction dans les orientations axiales  $zz$  et tangentielle  $\theta\theta$  du tube et d'un essai de torsion  $z\theta$  du



tube. Le résultat de l'identification est représenté à la  
 figure 9. Dans cette figure, les triangles repérés 31  
 correspondent à des points expérimentaux, la courbe 32  
 représente les résultats tels qu'ils sont obtenus en  
 5 appliquant les critères de von Mises avec un modèle  
 macroscopique classique de comportement du matériau, la  
 courbe 33 représente les résultats obtenus par un modèle  
 polycristallin selon l'art antérieur, et la courbe 34  
 représente les résultats obtenus avec le modèle selon  
 10 l'invention. Ces courbes montrent que le procédé selon  
 l'invention conduit à une très bonne concordance des  
 résultats expérimentaux et des résultats calculés pour  
 des tractions dans toutes les directions du plan  $zz-\theta\theta$ ,  
 ce qui n'est pas le cas de l'application simple des  
 15 critères de von Mises, ni le cas de l'utilisation d'un  
 modèle polycristallin selon l'art antérieur.  
 L'identification a demandé 2 heures de calcul sur une  
 station de calcul standard. L'identification du modèle  
 polycristallin selon l'art antérieur est décrite dans  
 20 "Philippe Geyer, Comportement élasto-viscoplastique de  
 tubes en Zircaloy-4 : approche expérimentale et  
 modélisation micromécanique, thèse de l'Ecole des Mines  
 de Paris, 9 décembre 1999". Cette identification a  
 nécessité plusieurs jours de calcul sur un ensemble de 5  
 25 à 10 stations de calcul travaillant simultanément. Le  
 résultat est moins bon qu'avec le modèle selon  
 l'invention non pas parce que le modèle polycristallin  
 selon l'art antérieur est moins bon que le modèle selon  
 l'invention, mais parce qu'il conduit à des calculs très  
 30 longs qui n'ont pas permis d'optimiser l'identification  
 des paramètres. Cet exemple montre l'intérêt du procédé  
 selon l'invention qui réduit de façon considérable les

temps de calcul et ainsi permet de déterminer l'effet de sollicitations mécaniques sur des objets dans des conditions dans lesquelles les méthodes selon l'art antérieur ne sont pas applicables.

5        Le procédé qui vient d'être décrit permet de calculer l'évolution des propriétés du matériau ainsi que ses endommagements. Il fait appel à des modèles visco-plastiques, mais l'homme du métier pourra utiliser tout  
10        modèle de comportement anélastique compatible avec un modèle polycristallin conforme à l'invention et notamment, les comportements en fluage et en fatigue fluage.

      Les endommagements correspondent soit à l'ouverture des briques "joint de grain" soit au grossissement des  
15        briques "trou". selon qu'on s'intéresse à un endommagement intergranulaire ou à un endommagement ductile. Dans les deux cas, l'homme de métier peut définir un critère de rupture défini, par exemple, par un seuil d'endommagement tel, qu'au delà, il y a rupture. On peut ainsi prévoir  
20        les conditions de rupture en service. Dans le cas de l'endommagement intergranulaire, dans le cadre d'une méthode par éléments finis, on peut définir un critère d'ouverture d'une brique "joint de grain" tel que, lorsque ce critère est satisfait, il y a fissure et, au  
25        point correspondant, la résistance mécanique est nulle. Dans le cas de l'endommagement ductile, dans le cadre d'une méthode par éléments finis, on peut définir une fraction volumique critique d'une brique "trou" telle que, lorsque ce critère est satisfait, il y a fissure et,  
30        au point correspondant, la résistance mécanique est nulle. Dans les calculs, on considère le point auquel ce critère est atteint en premier. Puis en prenant en compte

les points voisins sur lesquels les contraintes vont se reporter, on peut suivre la croissance de la fissure et ainsi déterminer les conditions d'apparition d'une rupture.

5        Le procédé selon l'invention peut être utilisé pour déterminer l'incidence du procédé de fabrication d'un objet comportant une opération de mise en forme par déformation plastique à froid, tels que l'emboutissage, et en particulier pour déterminer les propriétés  
10        mécaniques de l'objet en chacun de ses points. En effet, l'incidence d'une opération de mise en forme par déformation plastique sur les propriétés mécaniques dépend de la déformation effectivement réalisée et cette déformation dépend en général du point considéré. Les  
15        propriétés mécaniques après mise en forme ne sont donc pas, en général, identiques en tous points de l'objet. On peut alors utiliser l'évaluation de la répartition des propriétés mécaniques de l'objet obtenue par le procédé selon l'invention, pour déterminer le comportement en  
20        service de cet objet. L'avantage du procédé selon l'invention est que cette évaluation de la répartition des propriétés mécaniques d'un objet peut être faite dans des conditions très diverses à partir d'un nombre restreint d'essais mécaniques. En effet, pour évaluer les  
25        propriétés mécaniques d'objets constitués du même matériau, mais réalisés par mise en forme selon des modalités diverses, il suffit de réaliser les essais mécaniques nécessaires à la construction du modèle polycristallin selon l'invention, représentatif du  
30        matériau, puis appliquer le procédé selon l'invention à chacun des cas particuliers envisagés.

A titre d'exemple, on peut utiliser le procédé selon l'invention pour évaluer le comportement au choc d'une pièce de véhicules automobiles obtenue par emboutissage ou par pliage ou par tout autre procédé de mise en forme induisant des déformations plastiques. Pour cela, on construit le modèle polycristallin représentatif du matériau dont est constituée la pièce. On cale le modèle polycristallin à l'aide des essais mécaniques de traction ou traction/torsion ou cisaillement nécessaires. Puis, à l'aide d'une méthode de calcul telle qu'une méthode de calcul par éléments finis, incorporant le modèle polycristallin représentatif du matériau, on simule l'opération de mise en forme et on détermine les propriétés mécaniques de la pièce en chacun de ses points. A partir de ce résultat, et en utilisant une méthode de calcul adaptée connue de l'homme du métier, on détermine, par exemple, les effets sur les pièces d'un choc résultant d'une collision.

Lorsqu'on souhaite déterminer le comportement en service de différentes pièces réalisées dans le même matériau, on utilise le même modèle polycristallin représentatif du matériau pour effectuer les calculs de simulation de comportement. Ainsi, il n'est pas utile de faire des essais mécaniques pour chaque pièce.

Le procédé selon l'invention peut également être utilisé pour déterminer le comportement d'une pièce constituée d'un matériau pouvant présenter une transformation de phase, c'est-à-dire un changement de structure cristallographique sous l'effet des sollicitations thermomécaniques qu'il subit dans les conditions de service ou de mise en forme considérées.

C'est le cas, par exemple, d'un alliage à mémoire de forme isotrope qui possède deux phases, l'une stable à haute température (l'austénite), l'autre métastable à basse température (la martensite). La diminution de la température et/ou l'application d'une sollicitation mécanique induit un passage progressif de l'austénite vers la martensite. La transformation inverse est possible de façon réversible. Cette transformation de phases s'accompagne d'une déformation anélastique qui s'ajoute à la déformation propre de chaque phase prise indépendamment.

La simulation de cette transformation de phases est réalisée en utilisant des briques "grains" (7 en l'occurrence pour un matériau isotrope), chacune étant orientée dans le repère local macroscopique ( $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$ ) par ses angles d'Euler  $\Psi$ ,  $\phi$  et  $\varphi$ . Le comportement de chaque brique est simulé par les six systèmes de glissement précédemment décrits et leurs lois d'écrouissage connues par ailleurs. Les paramètres de ces lois de comportement correspondent dans un premier temps à ceux de l'austénite.

En cours de chargement thermomécanique, en fonction d'un critère bien défini et connu, par exemple par "Leclercq S., L'excellent C, A general macroscopic description of thermomechanical behaviour of shape memory alloys, J. Mech. Phys. Solids, Volume 44, pp 953-980, 1996", l'austénite est susceptible de se transformer en martensite, à une vitesse donnée. A chaque étape du calcul, on vérifie si ce critère est satisfait, et on attribue aux briques "grain" pour lesquelles le critère est satisfait, les caractéristiques mécaniques de la

martensite (évolution des paramètres des lois de comportement des systèmes de glissement de la martensite, connue par ailleurs). La déformation de transformation de phase qui résulte de cette évolution, apparaît alors  
5 lorsqu'on applique les règles de transition d'échelle du modèle.

Le modèle qui vient d'être décrit est essentiellement un modèle numérique qui peut être mis en œuvre par tout moyen approprié, en particulier, par ordinateur en  
10 l'intégrant dans un code de calcul par éléments finis connu en lui-même.

Ce modèle peut être utilisé de la même façon dans toute méthode de calcul de déformation de structure et, notamment, dans les méthodes de calculs aux différences  
15 finis ou dans des méthodes qui ne font intervenir qu'un point de l'objet étudié comme c'est le cas dans la modélisation du laminage de produits plats. L'homme du métier sait faire les adaptations nécessaires qui ne portent que sur l'intégration du modèle dans la méthode  
20 de calcul.

On a décrit les exemples d'application à des matériaux ayant des structures cristallographiques cubiques ou hexagonales. Mais l'invention ne se limite pas à ces exemples et l'homme du métier saura l'appliquer  
25 à d'autres structures cristallines et à des textures diverses. Elle s'applique également à des structures mixtes constituées de cristaux de natures différentes. Pour cela, il suffit de prendre en compte des briques "grain" dont une partie correspond à une structure  
30 cristalline et une autre partie correspond à une autre structure cristalline.

En résumé, le procédé selon l'invention, appliqué à un objet constitué d'un matériau déterminé et soumis pendant une période de temps déterminée à des sollicitations mécaniques et éventuellement thermiques  
5 déterminées, consiste à :

- choisir un modèle de comportement du type polycristallin conforme à l'invention, adapté au matériau,
- ajuster les paramètres du modèle de comportement à  
10 partir d'un nombre restreint d'essais mécaniques convenablement choisis,
- identifier l'effet des sollicitations mécaniques et éventuellement thermiques auxquelles l'objet est soumis pendant la période de temps considérée,
- 15 - et calculer l'effet des sollicitations en chaque point de l'objet en utilisant une méthode de calcul incorporant le modèle de comportement du matériau.

Le procédé peut être appliqué à tout type de matériau dont le comportement peut être représenté par un modèle  
20 du type polycristallin, et en particulier à tout matériau métallique.

Les sollicitations auxquelles sont soumises l'objet, qui peuvent être des efforts ou des déplacements répartis dans l'espace et dans le temps et qui peuvent être  
25 complétées par des sollicitations thermiques, peuvent être déterminées par tout moyen et en particulier par des enregistrements de mesures.

Les méthodes de calcul utilisées par le procédé sont des méthodes de calcul numérique mises en œuvre par  
30 ordinateur à l'aide de logiciels adaptés.

# REVENDECATIONS

1. Procédé pour déterminer les effets d'une sollicitation mécanique sur un objet constitué d'un matériau solide selon lequel on calcule les déformations et les contraintes engendrées par la sollicitation mécanique en une pluralité de points de l'objet au moyen d'une méthode de calcul numérique en mode anélastique dans laquelle le comportement du matériau solide est représenté par un modèle de comportement microscopique polycristallin utilisant une pluralité de briques « grain » dont les déformations sont déterminées à partir d'une pluralité de systèmes de glissement propres au matériau solide, la trace du tenseur des déformations microscopiques étant nulle, chaque brique "grain" ayant une orientation et une fraction volumique, caractérisé en ce que :

- le nombre de briques « grains » est inférieur ou égal à dix,

- le nombre de systèmes de glissement est inférieur ou égal à six,

en outre, le modèle microscopique utilise éventuellement:

- jusqu'à sept briques « joint de grain » ayant chacune une orientation et une fraction volumique, et dont les déformations sont déterminées à partir d'au moins un système d'ouverture, la trace du tenseur des déformations plastiques microscopiques de chaque brique « joint de grain » étant positive,

- au plus une brique « trou » ayant une fraction volumique variable, dont les déformations plastiques sont purement volumiques et dont la trace du tenseur des déformations plastiques microscopiques est positive.



2. Procédé selon la revendication 1, caractérisé en ce que les six systèmes de glissement associés à une brique « grain », définis dans un repère orthonormé associé à la brique « grain » par les normales aux plans de glissement et par les directions de glissement, sont tels que le double de la matrice d'orientation associée à chaque système de glissement ne soit constitué que de 0, 1 ou -1.

10

3. Procédé selon la revendication 1 ou la revendication 2, caractérisé en ce que pour un matériau isotrope à structure cubique, les déformations sont déterminées à partir de deux familles de trois systèmes de glissement, une première famille correspondant aux faces du cube, et la deuxième famille correspondant aux plans à 45° de ces faces, et en ce que le nombre de briques « grains » est égal à sept, les briques « grains » étant obtenues par symétrisation de deux briques « grains » primitives situées sur les grands cercles à 45° de la figure de pôles.

4. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 3 caractérisé en ce que on détermine en outre l'évolution de la texture du matériau en calculant la rotation  $\underline{Q}$  du réseau cristallin de chaque brique "grain" par rapport à un repère corotationnel.

5. Procédé selon la revendication 4 caractérisé en ce que, pour un matériau isotrope à structure cubique, le nombre de briques "grain" est égal à dix.

30

6. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 3, caractérisé en ce que on détermine en outre l'avancement d'une transformation de phase.

5

7. Procédé selon la revendication 6, caractérisé en ce que on attribue à chaque brique "grain", des caractéristiques fonction de l'avancement de la transformation de phase.

10

8. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 7, caractérisé en ce que les orientations et les fractions volumiques des briques « grains » sont déterminées par ajustement à partir d'essais de traction biaxiale et de traction torsion.

15

9. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 8, caractérisé en ce que, en l'absence de brique « trou », le modèle de passage du niveau macroscopique au niveau microscopique pour une brique « grain », permettant de calculer le tenseur des contraintes microscopiques  $\underline{\underline{\sigma}}_g$  dans la brique « grain » en fonction du tenseur des contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}$ , du tenseur  $\underline{\underline{\varepsilon}}_g^p$  des déformations plastiques microscopiques dans la brique « grain » et du tenseur  $\underline{\underline{E}}^p$  des déformations plastiques macroscopiques, s'écrit :

20

25

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta) [\eta(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + \alpha \underline{\underline{1}}] (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p)$$

avec,  $1/\alpha = 1 + DE_{eq}^{max}$ , et  $1/\eta = 2 + 5E_{eq}^{max}$ ,  $E_{eq}^{max}$  est la valeur maximale atteinte par le deuxième invariant de von Mises lors de la déformation.

30

10. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 9, caractérisé en ce que la méthode de calcul numérique est une méthode de calcul par éléments finis et en ce que à chaque point d'intégration de la méthode de calcul par éléments finis, on associe une seule brique « grain » et éventuellement une brique « joint de grain » ou une brique « trou », de telle sorte que la répartition des briques soit homogène.

10

11. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 10, caractérisé en ce que la méthode de calcul numérique est une méthode de calcul mécanique ou thermomécanique, faisant intervenir le temps.

15

12. Procédé selon la revendication 11, caractérisé en ce que on utilise une brique « trou » et qu'à l'instant initial du calcul numérique, la fraction volumique de la brique « trou » n'est pas nulle.

20

13. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 11, caractérisé en ce que le nombre de briques "joint de grain" est supérieur ou égal à un, et en ce que on définit un critère tel que, lorsqu'en un point de l'objet, le critère est satisfait, on attribue au point considéré une résistance mécanique du matériau nulle, de façon à simuler la présence d'une fissure.

25

14. Procédé selon l'une quelconque des revendications 1 à 8 et 10 à 12, caractérisé en ce que on utilise une brique "trou", et en ce que on définit un critère tel que, lorsqu'en un point de l'objet, le critère est

30

satisfait, on attribue au point considéré une résistance mécanique du matériau nulle, de façon à simuler la présence d'une fissure.

5        15. Procédé selon l'une quelconque des revendications  
1 à 14, caractérisé en ce que l'objet en matériau solide  
est une pièce métallique et en ce que la sollicitation  
mécanique est la sollicitation mécanique associée à une  
opération de mise en forme par déformation plastique  
10 telle que notamment l'emboutissage, l'étirage, le  
laminage, le cintrage ou le forgeage.

15        16. Procédé selon l'une quelconque des revendications  
1 à 15, caractérisé en ce que l'objet en matériau solide  
est une pièce métallique et en ce que la sollicitation  
mécanique est une sollicitation mécanique correspondant à  
l'utilisation de la pièce métallique.

20        17. Procédé selon la revendication 16, caractérisé en  
ce que l'utilisation en service de la pièce engendre au  
moins un phénomène, pris parmi les phénomènes de fluage,  
de fatigue et de fatigue-fluage.

1/6

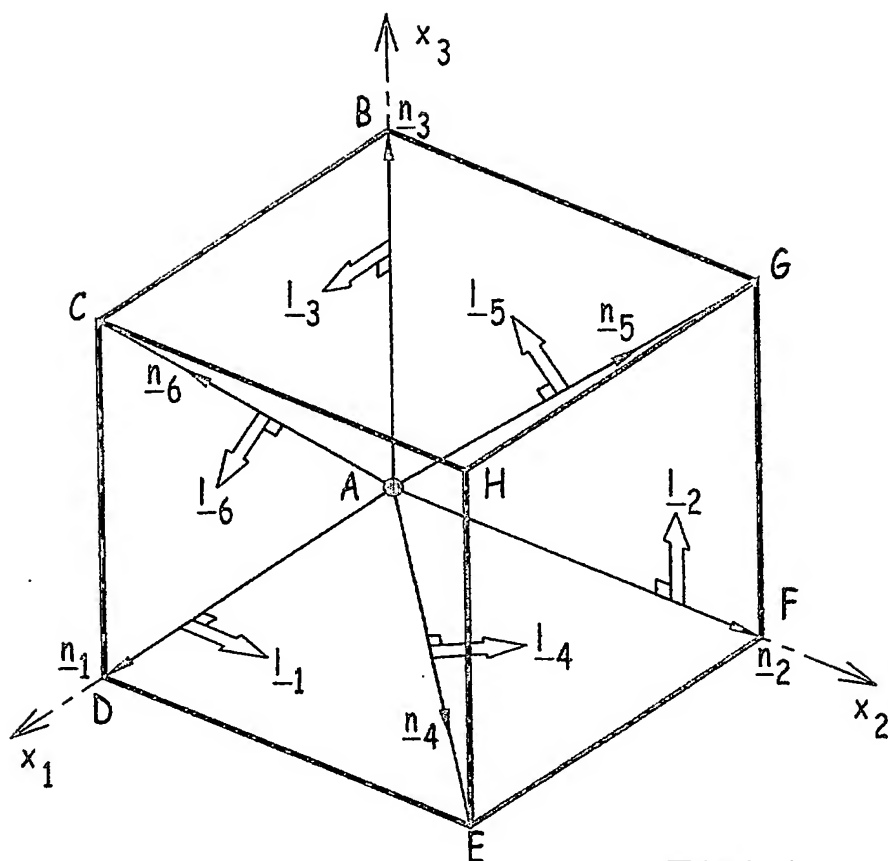


FIG. 1

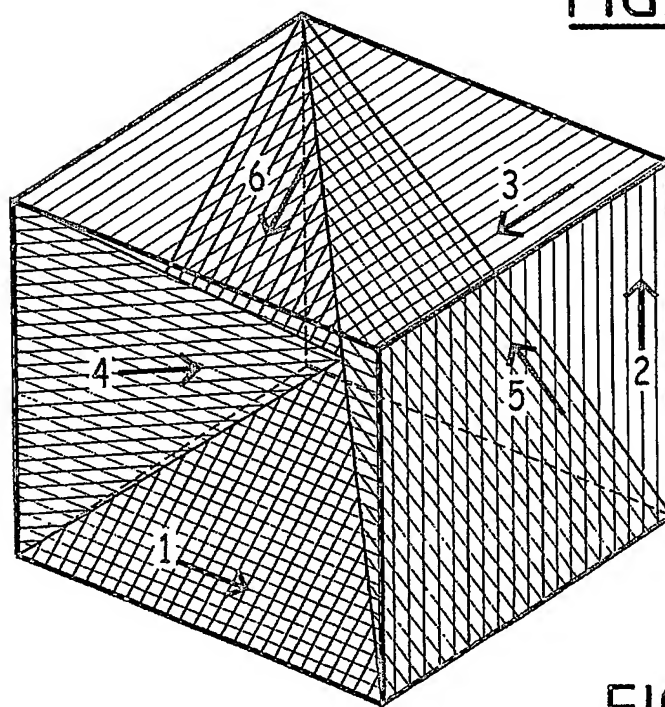


FIG. 2

2/6

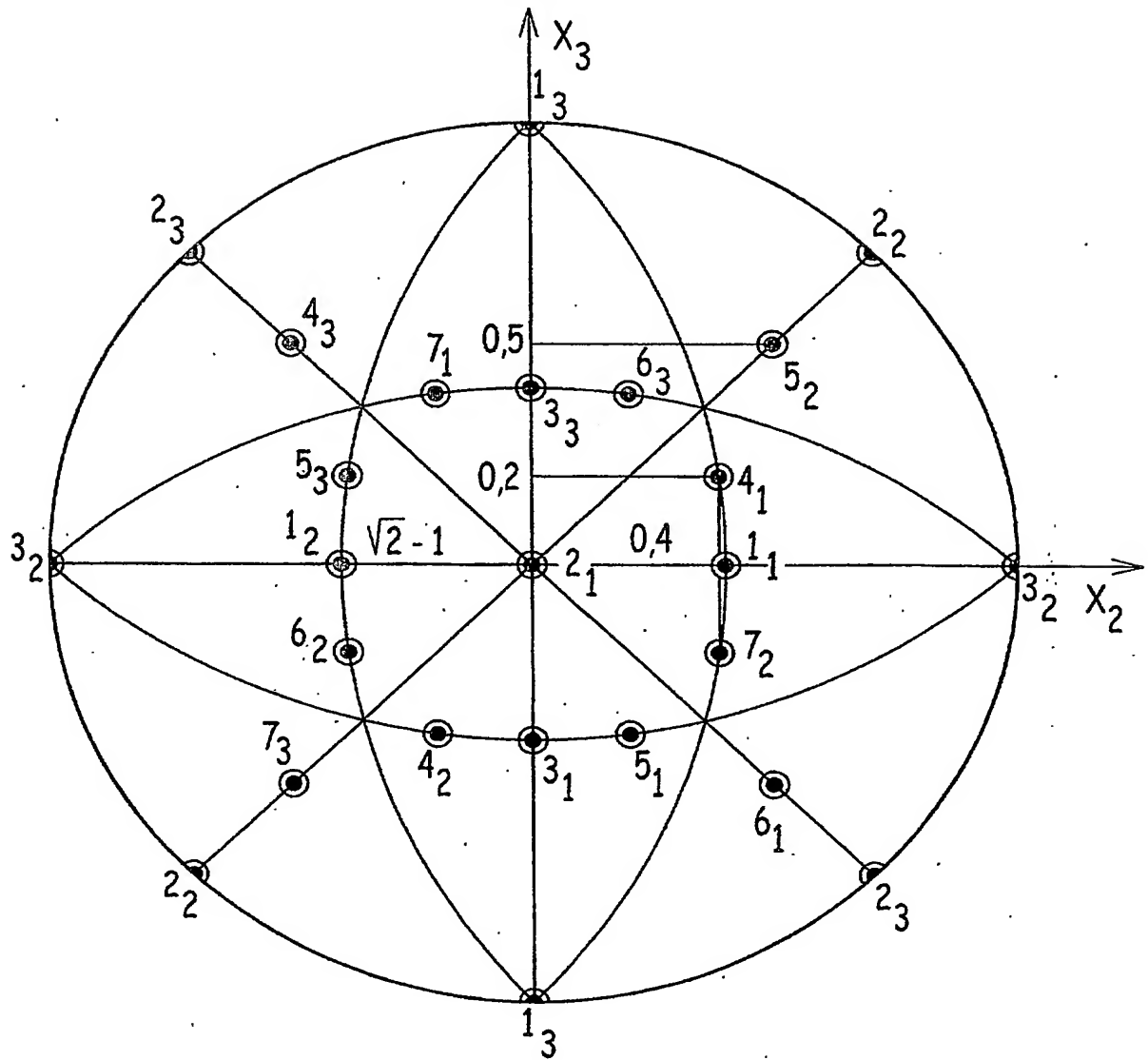


FIG.3

3/6

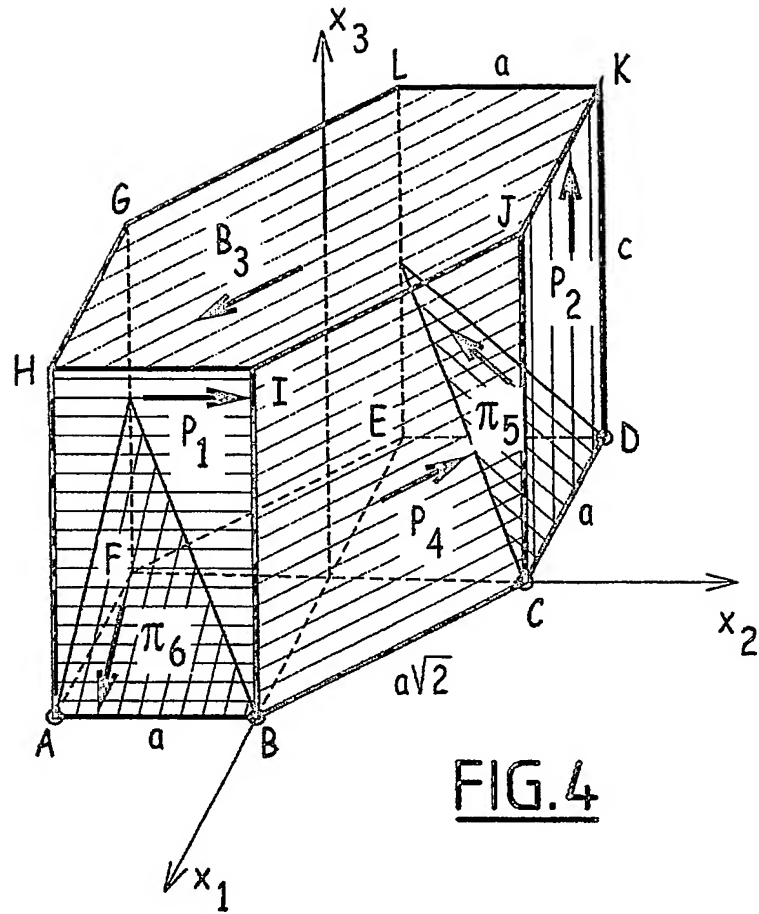


FIG.4

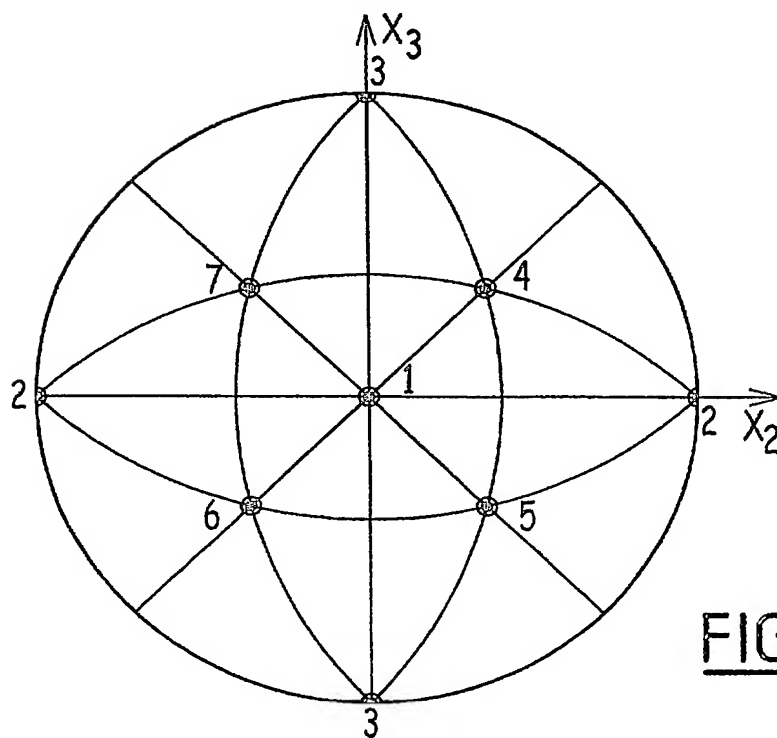


FIG.5

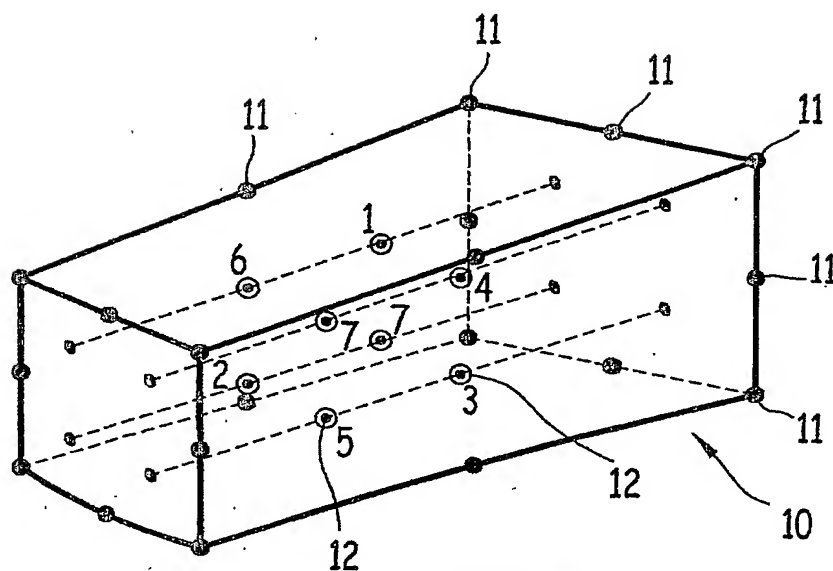


FIG. 6

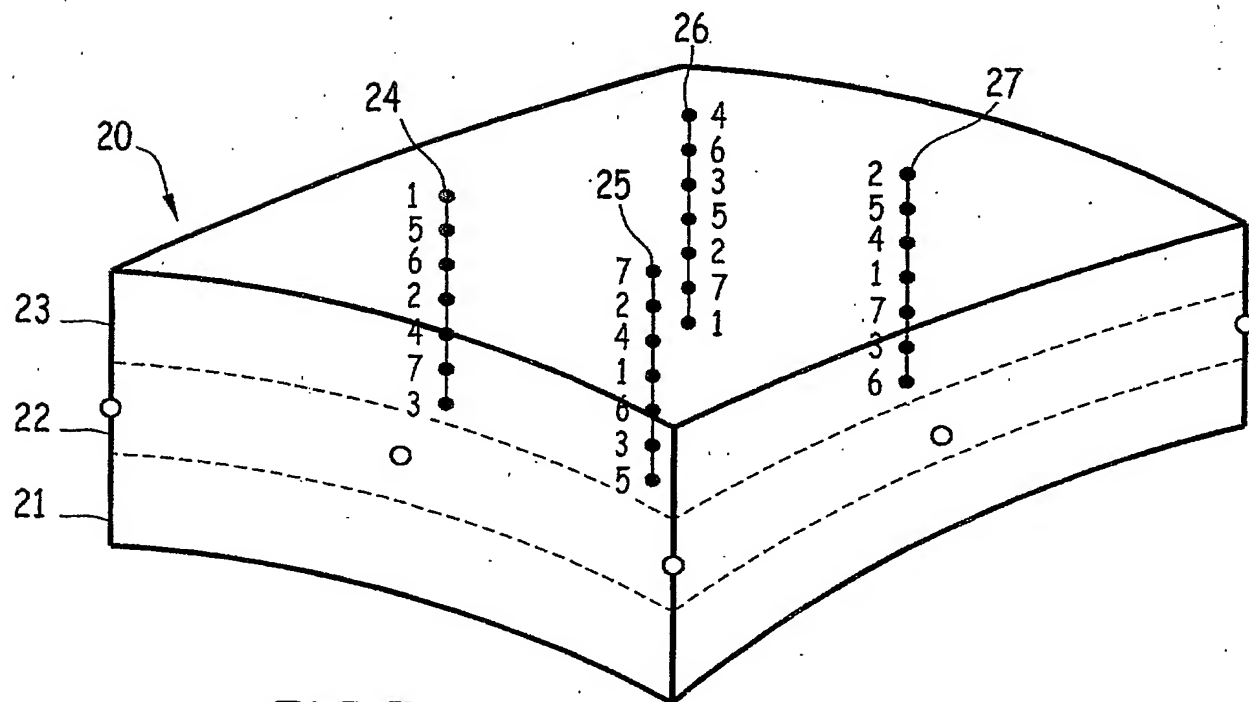


FIG. 7



5/6

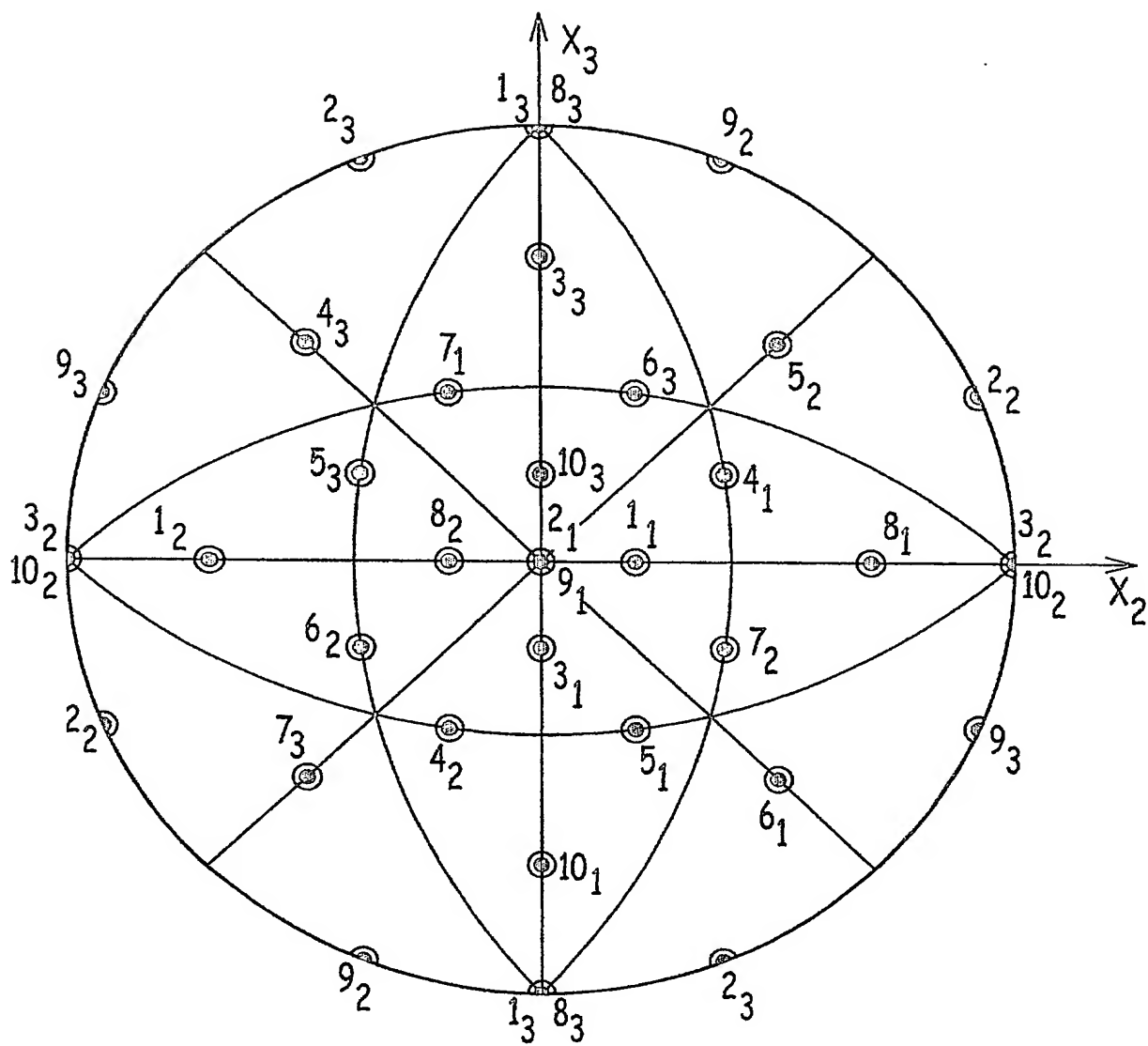


FIG. 8

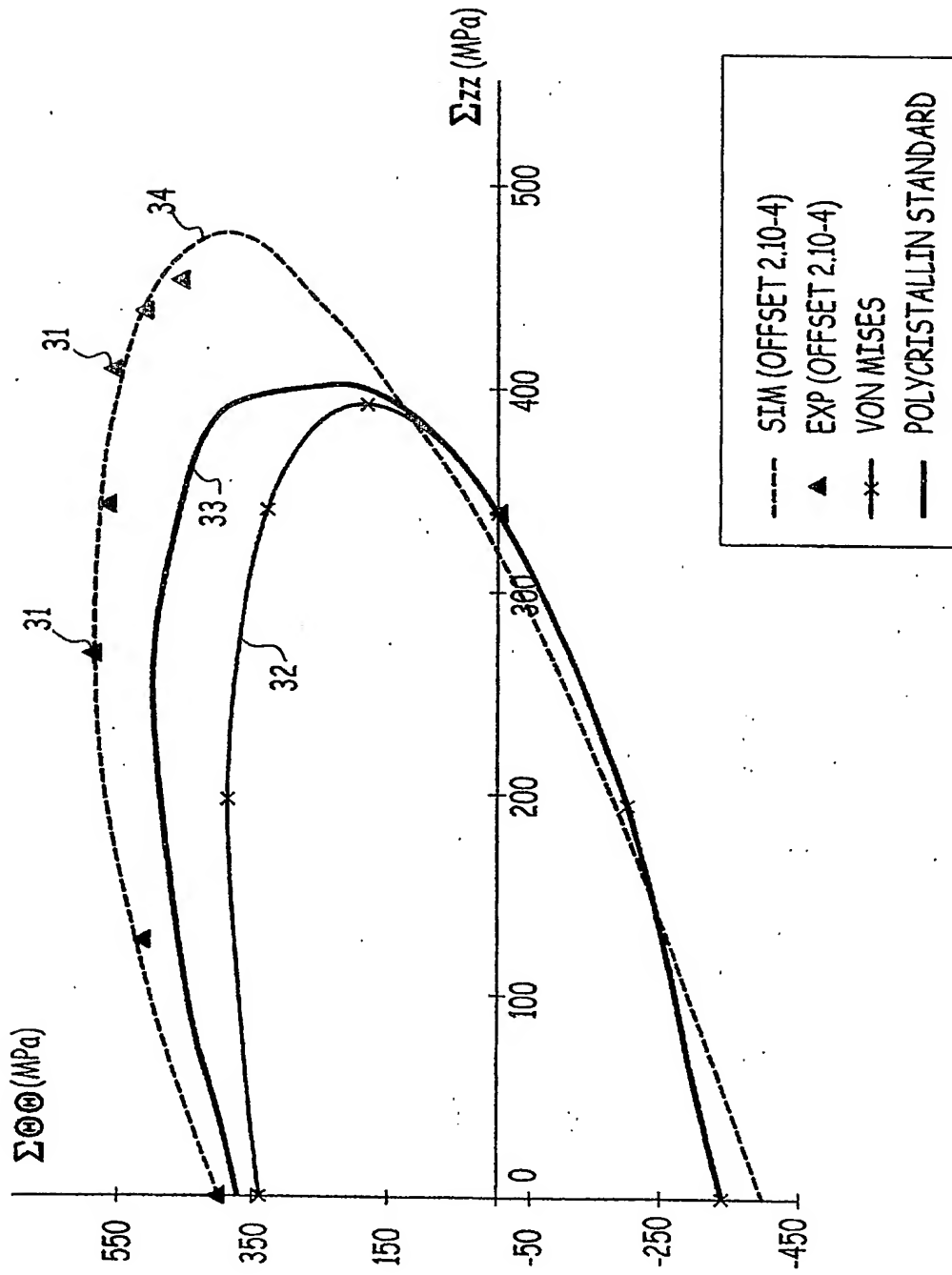


FIG.9



## BREVET D'INVENTION

## CERTIFICAT D'UTILITÉ

Code de la propriété intellectuelle - Livre VI

N° 11235\*03

## DÉPARTEMENT DES BREVETS

26 bis, rue de Saint Pétersbourg  
75800 Paris Cedex 08  
Téléphone : 33 (1) 53 04 53 04 Télécopie : 33 (1) 42 94 86 54

DÉSIGNATION D'INVENTEUR(S) Page N° 1. / 1.

(À fournir dans le cas où les demandeurs et  
les inventeurs ne sont pas les mêmes personnes)



Cet imprimé est à remplir lisiblement à l'encre noire

DB 113 W / 270601

Vos références pour ce dossier (facultatif)		BFF 03P0076	
N° D'ENREGISTREMENT NATIONAL		0300252	
TITRE DE L'INVENTION (200 caractères ou espaces maximum)			
Procédé de détermination des contraintes, déformations, endommagement de pièces constituées d'un matériau solide.			
LE(S) DEMANDEUR(S) :			
ELECTRICITE DE FRANCE - SERVICE NATIONAL			
DESIGNE(NT) EN TANT QU'INVENTEUR(S) :			
1. Nom		ROUSSELIER	
Prénoms		Gilles	
Adresse	Rue	33, rue des Sablons	
	Code postal et ville	77300 FONTAINEBLEAU FRANCE	
Société d'appartenance (facultatif)			
2. Nom		LECLERCQ	
Prénoms		Sylvain	
Adresse	Rue	40, rue de la Liberté	
	Code postal et ville	77210 SAMOREAU FRANCE	
Société d'appartenance (facultatif)			
3. Nom			
Prénoms			
Adresse	Rue		
	Code postal et ville		
Société d'appartenance (facultatif)			
S'il y a plus de trois inventeurs, utilisez plusieurs formulaires. Indiquez en haut à droite le N° de la page suivi du nombre de pages.			
DATE ET SIGNATURE(S) DU (DES) DEMANDEUR(S) OU DU MANDATAIRE (Nom et qualité du signataire)		Paris, le 28 juillet 2003  B. DOMENEGO n° 00-0500	

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning  
Operations and is not part of the Official Record**

**BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☒ **BLACK BORDERS**
- ☐ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☒ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKEWED/SLANTED IMAGES**
- ☐ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☒ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:** \_\_\_\_\_

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.**